



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**RENORMALIZACIÓN APLICADA A LAS
EXCITACIONES FONÓNICAS EN
SISTEMAS CUASIPERIÓDICOS**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A:

NAHUM CALDERÓN CHÁVEZ



**DIRECTOR DE TESIS:
DR. CHUMIN WANG CHEN**

2011



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

1. Datos del alumno
Calderón
Chávez
Nahum
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
407015180

2. Datos del tutor
Dr.
Chumin
Wang
Chen

3. Datos del sinodal 1
Dr.
Francisco
Morales
Leal

4. Datos del sinodal 2
Dr.
Raúl Patricio
Esquivel
Sirvent

5. Datos del sinodal 3
Dra.
Vicenta
Sánchez
Morales

6. Datos del sinodal 4
Dr.
Luis Antonio
Pérez
López

7. Datos del trabajo escrito
Renormalización aplicada a las excitaciones fonónicas en sistemas cuasiperiódicos
82 p
2011

Resumen

Esta tesis presenta un estudio de las excitaciones fonónicas usando un nuevo método de renormalización para sistemas cuasiperiódicos con multigrado de libertad por celda. Dicho método es una extensión del método de renormalización para un solo grado de libertad por sitio desarrollado previamente [Sánchez, 2004]. Esta extensión se basa en la técnica de matriz de matrices para la función de Green y en la conmutabilidad de la traza de un producto de matrices. Como ejemplo, se estudian los modos normales de vibración en una doble cadena cuasiperiódica en forma de escalera de tamaño macroscópico. El estudio de las excitaciones fonónicas en dicho sistema se realiza calculando la densidad de estados, la longitud de localización vía el coeficiente de Lyapunov y la conductancia de Landauer a través de la transmitancia. Además, se realiza un análisis comparativo entre las excitaciones fonónicas y las electrónicas.

En particular, la densidad de estados de la doble cadena cuasiperiódica se calcula en esta tesis mediante dos maneras: el método de renormalización más convolución y la nueva extensión del método de renormalización, con el fin de verificar la validez de dicha extensión. Además, esta extensión permite estudiar dobles cadenas mixtas, es decir, dos cadenas con ordenamiento atómico distinto entre sí. Por otro lado, el cálculo de la longitud de localización y de la transmitancia se lleva a cabo usando las matrices de transferencia de tamaño 4×4 e introduciendo el concepto de cadenas efectivas.

Para sistemas periódicos, los espectros obtenidos de las excitaciones fonónicas dentro de la aproximación de Born-von Karman son idénticos a los electrónicos en el modelo de amarre fuerte, excepto una traslación. Sin embargo, estos espectros responden de forma muy distinta al desorden estructural. Para el caso electrónico, se inicia la localización a partir de los extremos de la banda, en cambio, los fonones ópticos son los más propensos a la localización contrario a los acústicos. Además, la doble cadena permite la existencia de estados de naturaleza acústica en el centro del espectro, los cuales son poco sensibles al desorden estructural y pueden emplearse para una transmisión fonónica eficiente en alta frecuencia dentro de un sistema desordenado.

Contenido

| | |
|--|----|
| Introducción | 1 |
| Capítulo 1 Orden Atómico en Sólidos. | 4 |
| 1.1. Arreglo Cristalino | 4 |
| 1.1.1. Teorema de Bloch | 6 |
| 1.1.2. Densidad de estados | 7 |
| 1.2. Desorden Estructural | 11 |
| 1.2.1. Localización de Anderson | 11 |
| 1.2.2. Teoría de Mott | 14 |
| 1.3. Cuasicristales. | 15 |
| 1.3.1. Aleaciones cuasicristalinas | 17 |
| 1.3.2. Superredes cuasiperiódicas | 18 |
| 1.4. Redes de Fibonacci | 18 |
| 1.4.1. Definición de la cuasiperiodicidad | 19 |
| 1.4.2. Métodos de construcción | 20 |
| Capítulo 2 Excitaciones Fonónicas | 24 |
| 2.1. Modos Normales de Vibración | 24 |
| 2.2. Operadores de Creación y Aniquilación | 27 |
| 2.3. Potencial de Born-von Karman | 30 |
| 2.4. Método de Renormalización | 33 |
| 2.5. Teorema de Convolución | 39 |
| Capítulo 3 Doble Cadena Cuasiperiódica | 44 |
| 3.1. Densidad de Estados | 44 |
| 3.2. Localización vía Lyapunov | 53 |
| 3.3. Conductancias de Landauer | 56 |
| 3.4. Resumen de los Resultados. | 59 |
| Conclusiones | 63 |
| Apéndice A Función de Green | 65 |
| Apéndice B Matrices de Transferencia | 67 |
| Apéndice C Renormalización en Cadenas Simples | 72 |
| Apéndice D Renormalización en Cadenas Complejas | 75 |
| Referencias | 79 |

Introducción

La física estudia las reglas fundamentales de la naturaleza y particularmente la física del estado sólido moderna basada en la mecánica cuántica es capaz de predecir propiedades físicas de materiales y dispositivos. Hoy en día, los avances en esta rama de la física ha modificado la convivencia de nuestra sociedad a través del uso de la telefonía celular, la televisión y el automóvil. Los dispositivos electrónicos actuales se basan directamente en nuestro conocimiento de la física del estado sólido.

Los sólidos cristalinos están constituidos por un arreglo periódico de átomos, el cual se describe a través de una red cristalina de puntos que indica la posición espacial y tiene el mínimo volumen conocida como la celda unitaria primitiva. La correspondiente de la red recíproca se denomina como la primera zona de Brillouin [Kittel, 1996]. Esta zona contiene todos los estados cuánticos y en consecuencia cualquier fenómeno físico del sistema puede ser analizado usando únicamente los estados de dicha zona.

Por otro lado, existen los materiales amorfos cuyo ordenamiento atómico es desordenado pudiendo ser estructural o sustitucional; en el primero la posición de los átomos es aleatoria persistiendo únicamente el orden de corto alcance, mientras que en el segundo los átomos de diferente naturaleza son colocados aleatoriamente en una red periódica.

Una de las consecuencias más importantes del desorden es la localización de las excitaciones elementales en sólidos. Existen diversas formas de cuantificar el grado de localización en un sistema desordenado, por ejemplo mediante el coeficiente de Lyapunov, la razón de participación y la estadística de niveles [Salazar, 2003].

En 1982, Dan Shechtman observó el primer cuasicristal reportando dos años después [Shechtman, 1984] sus patrones de difracción con una simetría icosaedral tridimensional prohibida por la cristalografía tradicional. Este descubrimiento fue recientemente reconocido con el Premio Nobel de Química 2011.

Para los matemáticos, las funciones cuasiperiódicas han sido estudiadas desde 50 años antes de la primera observación experimental [Besicovitch, 1932]. Una de las redes cuasiperiódicas más estudiada es la de Fibonacci, en la cual se puede variar la naturaleza de sus átomos, la interacción entre ellos o ambas, es decir, el problema de sitios, de

enlaces o mixto. Una de las características más importantes de los cuasicristales es su orden orientacional de largo alcance en lugar de la traslacional en un sólido cristalino.

En estos sistemas la cuasiperiodicidad invalida el teorema de Bloch y la utilización del espacio recíproco. Por lo cual, se requieren nuevos métodos para estudiar los sistemas cuasiperiódicos. Además, estos sistemas son particularmente sensibles a las condiciones de frontera ficticias, tales como cíclicas o truncadas. Las primeras introducen estados espurios mientras que las segundas localizan los estados en los extremos de cada minibanda. Cabe mencionar que los sistemas cuasiperiódicos poseen espectros singularmente continuos con medida de Lebesgue igual a cero [Sütő, 1989], en otras palabras, dichos espectros están constituidos de un número infinito de minibandas cuyos extremos son modificados por las condiciones de frontera ficticias.

Uno de los métodos capaces de abordar sistemas cuasiperiódicos de tamaño macroscópico es el de renormalización en el espacio real. Dicho método tiene la virtud de tener un tiempo computacional que crece en forma logarítmica con el tamaño del sistema sin introducir aproximaciones adicionales a los cálculos, en comparación con el método de diagonalización exacta cuyo tiempo de cómputo crece en forma cúbica con el tamaño del sistema, es decir, usando la capacidad de cómputo actual se puede estudiar únicamente sistemas menores que 10^5 átomos.

En esta tesis se presenta una extensión del método de renormalización en el espacio real para sistemas con multigrados de libertad por celda, así como su aplicación a una doble cadena cuasiperiódica de tamaño macroscópico. Las propiedades físicas presentadas son calculadas a través de programas desarrollados en el lenguaje de programación Fortran.

La presente tesis está organizada en tres capítulos. En la primera se comienza con un breve repaso de la teoría de sólidos cristalinos y se continúa con materiales desordenados así como sistemas cuasiperiódicos poniendo particular atención en las redes de Fibonacci.

En el segundo capítulo se introduce el concepto de los modos normales de vibración y se discuten hamiltonianos de las excitaciones fonónicas en el formalismo de segunda cuantización. También se introduce el modelo de Born-von Karman mostrando su separabilidad en redes cúbicamente estructurados. Se presenta el método de renormalización en el espacio real para un átomo por sitio y la

extensión en dicho método hacia multigrados de libertad por sitio. Además, se introduce el teorema de convolución y su posible combinación con el método de renormalización.

En el tercer capítulo se presentan la densidad de estados, la longitud de localización a través del coeficiente de Lyapunov y la conductancia de Landauer mediante la transmitancia obtenidos del nuevo método de renormalización para una cadena doble cuasiperiódica tipo Fibonacci haciendo una comparación entre las excitaciones fonónicas con las electrónicas. Se continúa con un resumen de resultados comparativo entre las propiedades físicas mencionadas. Los resultados importantes de esta tesis y algunas perspectivas se presentan en la sección de conclusiones.

Por último, la tesis contiene una sección amplia de apéndices los cuales detallan el fundamento físico y el desarrollo algebraico de los métodos utilizados. En particular, el apéndice A define la función de Green a través de la ecuación de Dyson y su correlación con la densidad de estados. En el apéndice B se desarrolla el formalismo de las matrices de transferencia y la aplicación al problema de la doble cadena. En el apéndice C se encuentra un resumen del método de renormalización para un átomo por sitio y finalmente en el apéndice D se presentan las nuevas relaciones de recurrencia de la extensión del citado método para multigrado de libertad por sitio.

Capítulo 1 Orden Atómico en Sólidos

Los sólidos macroscópicos son sistemas complejos que tienen 10^{23} grados de libertad, cuyas propiedades están íntimamente ligadas con el ordenamiento atómico en éstos. Para inicios del siglo veinte, los estudios de la difracción de rayos X revelan la existencia de una relación estrecha entre el orden atómico y las propiedades macroscópicas de un sólido. Por ejemplo, el diamante y el grafito son variedades alotrópicas del carbono, es decir, ambos sólidos están constituidos por átomos de carbono y tienen propiedades muy distintas debido al ordenamiento de los mismos como se muestra en la Tabla 1.1.

Tabla 1.1 Algunas propiedades físicas del diamante y del grafito.

| Alótropos | Orden Atómico | Hibridación | Densidad | Resistividad Eléctrica | Conductividad Térmica | Módulo de Young |
|-----------|---------------|-------------|------------------------|---------------------------|-----------------------|-----------------|
| Diamante | Tetraédrico | sp^3 | 3.52 g/cm ³ | 10^{11} - 10^{14} Ω·m | 2000 W/m·K | 1220 GPa |
| Grafito | Hexagonal | sp^2 | 2.16 g/cm ³ | 10^{-5} - 10^{-6} Ω·m | 80-250 W/m·K | 34 GPa |

En este capítulo, se presentan los diferentes tipos de ordenamiento atómico que se han encontrado en los sólidos, tales como cristales, amorfos y cuasicristales. En estos últimos, existe un orden intrínseco derivado de la proyección con pendiente irracional a partir de una red periódica en un espacio de mayor dimensión.

1.1 Arreglo Cristalino

Los sólidos cristalinos se distinguen de los demás sólidos por su arreglo periódico de átomos, el cual se describe a través de una red cristalina de puntos que indica la posición espacial de la celda unitaria. Existen únicamente 14 formas periódicas diferentes de arreglar átomos idénticos en el espacio tridimensional, las cuales se denominan las redes de Bravais [Kittel, 1996].

En un espacio tridimensional, la posición de las celdas unitarias puede expresarse como

$$\mathbf{R}_l = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3, \quad (1.1)$$

donde l_1 , l_2 y l_3 son números enteros mientras que \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 son los vectores base de la red cristalina. La celda unitaria que tiene el mínimo volumen posible se denomina celda unitaria primitiva. Una de las formas de obtener las primitivas es el método de Wigner-Seitz, como se muestra en la Figura 1.1 para una red hexagonal bidimensional.

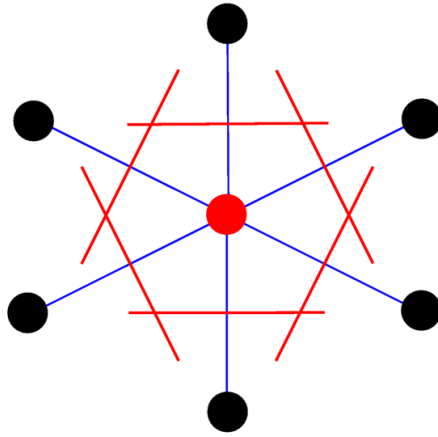


Figura 1.1 Construcción de una celda de Wigner-Seitz para una red hexagonal bidimensional.

A partir de la red cristalina, se puede definir una red recíproca mediante la introducción de sus vectores base \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 y \mathbf{b}_3 de la siguiente forma,

$$\mathbf{b}_1 \equiv 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}, \quad \mathbf{b}_2 \equiv 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad \text{y} \quad \mathbf{b}_3 \equiv 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}. \quad (1.2)$$

De modo que $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$ y los vectores de la red recíproca puede escribirse como

$$\mathbf{G}_h = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3 \quad (1.3)$$

donde h_1 , h_2 y h_3 son números enteros. La celda unitaria primitiva de la red recíproca se denomina como la primera zona de Brillouin [Kittel, 1996].

Una de las formas tradicionales para determinar las posiciones atómicas en un sólido es la difracción usando rayos X o electrones, como se muestra en la Figura 1.2, donde la longitud de onda (λ) es la misma durante la difracción y la interferencia constructiva se obtiene para los ángulos (θ) que satisfacen la ley de Bragg [Kittel, 1996],

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (1.4)$$

siendo d la distancia interplanar y n el orden de difracción. La condición de difracción (1.4) puede expresarse alternativamente a través de las ecuaciones de von Laue [Kittel, 1996],

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{G}_h \quad (1.5)$$

donde \mathbf{k}_0 y \mathbf{k} son los vectores de onda del haz incidente y haz difractado, respectivamente.

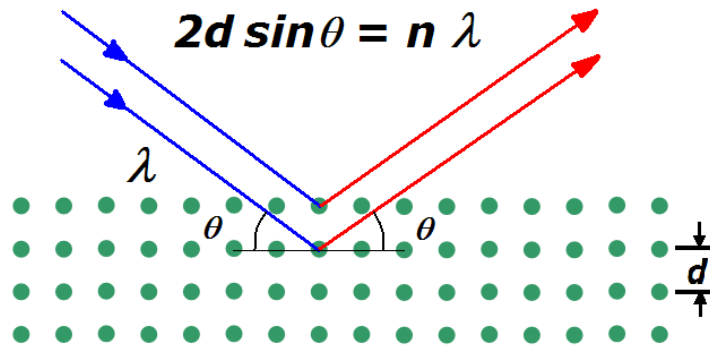


Figura 1.2 Dibujo esquemático de la difracción mediante interferencias constructivas en la ley de Bragg.

En la Figura 1.3 se muestra un típico patrón de difracción obtenido de un cristal mediante la microscopía electrónica de transmisión (TEM). Cabe mencionar que a partir del patrón de difracción se obtienen los vectores de onda \mathbf{k} difractada y conociendo el \mathbf{k}_0 incidente se puede determinar \mathbf{G}_h mediante la ecuación (1.5). Analizando una serie de vectores \mathbf{G}_h distintos se puede obtener los vectores base de la red recíproca \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 y \mathbf{b}_3 . Finalmente, se determina los vectores de la red cristalina \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 mediante una transformación inversa de la ecuación (1.2).

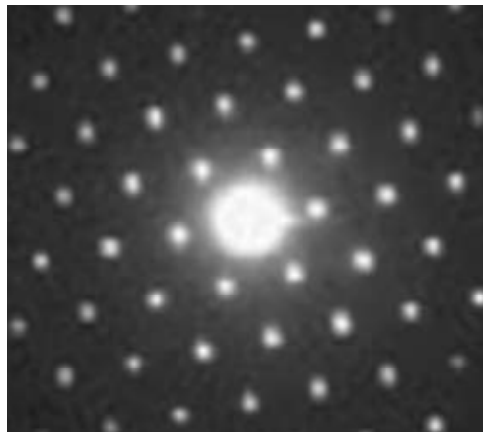


Figura 1.3 Patrón de difracción de electrones en la dirección [111] para un cristal de $\text{Ca}_3\text{Cr}_2(\text{SiO}_4)_3$ [Zou, 2008].

1.1.1 Teorema de Bloch

El electrón en un sólido tiene una masa efectiva generalmente diferente a su masa en el vacío, debido a su interacción con la red cristalina. La dinámica de dicho electrón en la posición \mathbf{r} está determinada por el

siguiente hamiltoniano dentro de la aproximación de campo medio [Ashcroft, 1976],

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad (1.6)$$

donde $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ es una función periódica siendo \mathbf{R} un vector de la red cristalina. La solución de la ecuación de Schrödinger estacionaria correspondiente al hamiltoniano (1.6) está dada por el teorema de Bloch [Ashcroft, 1976], es decir, su función de onda (Ψ) siempre tiene la siguiente forma,

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.7)$$

siendo $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ una función periódica con el mismo período de la red cristalina. Esta función de onda no es generalmente periódica en el espacio real, ya que $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ puede tener un período incomensurado con el de la red cristalina. Sin embargo, dicha función sí es periódica en el espacio recíproco [Ibach, 2009], es decir,

$$\Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.8)$$

donde \mathbf{G} es un vector de la red recíproca. En consecuencia, la energía del electrón o el eigenvalor de la ecuación de Schrödinger estacionaria también es una función periódica en el espacio recíproco,

$$E(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = E(\mathbf{k}). \quad (1.9)$$

Esto conduce a que la primera zona de Brillouin contiene todos los estados cuánticos del sistema y que cualquier fenómeno físico puede ser analizado estudiando únicamente los estados de dicha zona. Cabe mencionar que el cuadrado de la función de la onda $|\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2$ siempre es una función periódica, en otras palabras, la probabilidad de encontrar el electrón es la misma en todas las celdas unitarias cuya función de onda se denomina *extendida*.

1.1.2 Densidad de Estados

Basado en la hipótesis ergódica de Boltzmann que asume la igualdad entre el promedio temporal $\langle A \rangle_{tiempo}$ y el promedio sobre el ensamble $\langle A \rangle_{ensamble}$, las mediciones teóricas pueden calcularse a través del siguiente promedio estadístico,

$$\langle A \rangle_{tiempo} = \langle A \rangle_{ensamble} = \iiint A(\mathbf{k}) f(E_{\mathbf{k}}) d\mathbf{k}, \quad (1.10)$$

siendo A cualquier cantidad física y $f(E_{\mathbf{k}})$ es la función de distribución que puede ser de Maxwell-Boltzmann, Bose-Einstein o Fermi-Dirac, dependiendo de la naturaleza del sistema. Para el caso de que $A(\mathbf{k})=A(E_{\mathbf{k}})$, el promedio de la ecuación (1.10) puede reescribirse como

$$\langle A \rangle_{ensamble} = \int A(E) f(E) g(E) dE, \quad (1.11)$$

donde

$$g(E) dE = \iint_E d\mathbf{k} \quad (1.12)$$

y la doble integral se efectúa sobre superficies de energía constante. La función $g(E)$ se denomina la densidad de estados (*DOS*) del sistema que contiene toda la información estructural del mismo, ya que $A(E)$ no depende del sistema y $f(E)$ depende únicamente de la naturaleza de las partículas constituyentes. Por lo tanto, para predecir mediciones de cantidades físicas tales como el calor específico y la conductividad, se requiere únicamente conocer la *DOS* de cada sistema bajo estudio.

A continuación, se ejemplifica el uso de la *DOS* analizando el modelo de Debye para el calor específico fonónico de un cristal cúbico de s dimensiones. Para el caso de un solo oscilador armónico unidimensional, la energía (E) está cuantizada de la siguiente forma

$$E = (n + 1/2) \hbar\omega, \quad (1.13)$$

y la energía promedio está dada por

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} (n + 1/2) \hbar\omega \exp[-(n + 1/2) \hbar\omega / k_B T]}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp[-(n + 1/2) \hbar\omega / k_B T]} = \hbar\omega \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \exp(-nx)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-nx)} + \frac{1}{2} \hbar\omega, \quad (1.14)$$

donde $x = \hbar\omega / k_B T$. Por lo tanto, la ecuación (1.14) puede reescribirse como

$$\langle E \rangle = \left[-\frac{d}{dx} \ln \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-nx) + \frac{1}{2} \right] \hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega / k_B T) - 1} + \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (1.15)$$

Ahora, para un sólido de N átomos en un espacio de s dimensiones la energía fonónica promedio es

$$\langle E \rangle = \sum_{i=1}^{sN} \left[\frac{\hbar\omega_i}{\exp(\hbar\omega_i / k_B T) - 1} + \frac{\hbar\omega_i}{2} \right]. \quad (1.16)$$

Como nos interesa analizar el calor específico (C_V) que es la derivada de la energía promedio respecto a la temperatura, el segundo término ($\hbar\omega_i/2$) de la ecuación (1.16) puede omitirse ya que su derivada siempre es cero, esto es,

$$\langle E \rangle = \sum_{i=1}^{sN} \left[\frac{\hbar\omega_i}{\exp(\hbar\omega_i/k_B T) - 1} \right]. \quad (1.17)$$

Dado que los modos vibracionales están cuantizados en el espacio k por una $\Delta k = 2\pi/L$, donde $L = \tilde{N}a$ es el tamaño del sistema en cada dimensión y $N = \tilde{N}^s$ en un sólido cúbico, la ecuación (1.17) puede reescribirse como

$$\langle E \rangle = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^s \sum_{\sigma=1}^s \int \dots \int d^1 k \dots d^s k \left[\frac{\hbar\omega_{\sigma}(\mathbf{k})}{\exp(\hbar\omega_{\sigma}(\mathbf{k})/k_B T) - 1} \right], \quad (1.18)$$

donde la suma de σ toma en cuenta los modos longitudinales y transversales para un sólido multidimensional.

Recordando que la densidad de estados $g(\omega)$ es el número de estados que se encuentran entre ω y $\omega+d\omega$, ésta constituye una cáscara con espesor $d\omega$ en el espacio k de s dimensiones, es decir [Dalvit, 1999],

$$g(\omega)d\omega = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^s \sum_{\sigma=1}^s \int \dots \int_{\omega} d^1 k \dots d^s k = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^s \sum_{\sigma=1}^s s \frac{\pi^{s/2}}{\left(\frac{s}{2}\right)!} k^{s-1} \frac{dk}{d\omega_{\sigma}} d\omega_{\sigma}. \quad (1.19)$$

Con el fin de analizar el calor específico vibracional a bajas temperaturas, los estados fonónicos ocupados son de naturaleza acústica, por lo que $\omega \approx ck$ (aproximación de Debye) para todos los valores de σ , siendo c la velocidad de sonido. La ecuación (1.19) puede reescribirse como

$$g(\omega)d\omega = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^s s^2 \frac{\pi^{s/2}}{\left(\frac{s}{2}\right)!} \left(\frac{\omega}{c} \right)^{s-1} \frac{1}{c} d\omega. \quad (1.20)$$

Por lo tanto, el procedimiento de (1.10) a (1.11) se aplica a la ecuación (1.18) y se obtiene

$$\langle E \rangle = \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} g(\omega)d\omega, \quad (1.21)$$

donde $\beta = 1/k_B T$ y ω_D es la frecuencia de Debye siendo la máxima frecuencia que puede tener un fonón en el sólido bajo estudio, es decir,

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)d\omega = sN. \quad (1.22)$$

Sustituyendo la ecuación (1.20) en (1.22) se tiene que

$$sN = \left(\frac{L}{2\pi c} \right)^s s^2 \frac{\pi^{s/2}}{\left(\frac{s}{2}\right)!} \int_0^{\omega_D} \omega^{s-1} d\omega = \left(\frac{L}{2\pi c} \right)^s s \frac{\pi^{s/2}}{\left(\frac{s}{2}\right)!} \omega_D^s, \quad (1.23)$$

entonces

$$\omega_D = \left(\frac{2\pi c}{L} \right) \left(\frac{\left(\frac{s}{2}\right)!}{\pi^{s/2}} N \right)^{1/s}. \quad (1.24)$$

Por otro lado, sustituyendo la *DOS* (1.20) en la ecuación (1.21) se tiene

$$\langle E \rangle = \left(\frac{L}{2\pi c} \right)^s s^2 \frac{\hbar \pi^{s/2}}{\left(\frac{s}{2}\right)!} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^s}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} d\omega = \left(\frac{L}{2\pi c \beta \hbar} \right)^s s^2 \frac{\pi^{s/2}}{\left(\frac{s}{2}\right)! \beta} \int_0^{x_D} \frac{x^s}{e^x - 1} dx \quad (1.25)$$

siendo $x = \beta \hbar \omega$ y $x_D = \beta \hbar \omega_D$. Si se define la temperatura de Debye $\theta_D \equiv \hbar \omega_D / k_B$ y usando ecuación (1.24), la ecuación (1.25) se simplifica a

$$\langle E \rangle = s^2 N k_B T \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^s \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^s}{e^x - 1} dx. \quad (1.26)$$

Para el caso de altas temperaturas $T \gg \theta_D$, se tiene que $x \ll 1$, entonces

$$\langle E \rangle = s N k_B T \Rightarrow C_V = \frac{d\langle E \rangle}{dT} = s N k_B; \quad (1.27)$$

esta última se conoce como la ley de Dulong-Petit, solución clásica de la capacidad calorífica. Por otro lado, para el caso de bajas temperaturas $T \ll \theta_D$, se tiene que

$$\langle E \rangle = s^2 N k_B T \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^s \int_0^\infty \frac{x^s}{e^x - 1} dx. \quad (1.28)$$

por lo tanto,

$$C_V = \frac{d\langle E \rangle}{dT} = s^2 (s+1) N k_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^s \int_0^\infty \frac{x^s}{e^x - 1} dx. \quad (1.29)$$

Para el caso $s=3$ y bajas temperaturas,

$$C_V = 36 N k_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = 36 N k_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \frac{\pi^4}{15} = \frac{12\pi^4 N k_B}{5} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3. \quad (1.30)$$

En resumen, se ha calculado la capacidad calorífica fonónica para un sólido de s dimensiones dentro del modelo de Debye, encontrando que $C_v \sim T^s$ a bajas temperaturas.

1.2 Desorden Estructural

En un sólido pueden existir diversos tipos de desorden, por ejemplo, el desorden estructural donde la posición de los átomos es casi aleatoria persistiendo únicamente el orden de corto alcance entre los vecinos más cercanos. Otro ejemplo del desorden es el sustitucional donde átomos distintos colocados arbitrariamente forman una red cristalina. En la Figura 1.4 se compara una estructura cristalina con una estructura desordenada. Nótese que en este arreglo cristalino existen sólo anillos de 6 átomos, mientras que en el amorfo coexisten anillos de 5, 6 y 7 átomos.

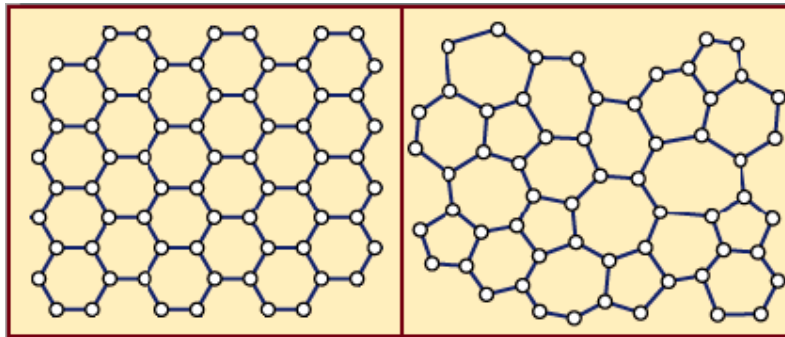


Figura 1.4 Arreglo atómico de un sólido cristalino (izquierda) y amorfo (derecha).

El desorden estructural puede cuantificarse mediante las funciones de distribución atómica. En particular, la función de distribución de pares [$g(1,2) = g(\mathbf{R}_{12})$] contiene información importante del arreglo atómico; más aún, la función de distribución radial [$g(\mathbf{R}_{12}) = g(R)$] proporciona una forma simple y eficaz de cuantificar el grado de desorden de un arreglo atómico, omitiendo la posible anisotropía [Ziman, 1979].

1.2.1 Localización de Anderson

En 1958, Philip W. Anderson propuso que las eigenfunciones de un sistema desordenado pueden ser localizadas, es decir, la amplitud de la función de onda se concentra en una región reducida del sistema [Anderson, 1958]. Para esto, se partió del siguiente hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_n \varepsilon_n |n\rangle\langle n| + V \sum_{n,m} |n\rangle\langle m|, \quad (1.31)$$

donde $|n\rangle$ es la función de Wannier centrada en el sitio n , $\varepsilon_n \in [-W/2, W/2]$ es su autoenergía y V es la integral de salto entre sitios más cercanos. Además, se asume que ε_n son estadísticamente independientes teniendo la distribución $P(\varepsilon_n)$ constante dentro del intervalo de ancho W ,

$$P(\varepsilon_n) = \begin{cases} 1/W, & \text{si } |\varepsilon_n| < W/2 \\ 0, & \text{otros casos} \end{cases}. \quad (1.32)$$

Por lo que los eigenestados se vuelven localizados si el cociente $\delta = W/V$ es suficientemente grande. El valor crítico de δ aumenta con el número de coordinación que es el número de vecinos más cercanos.

En la Figura 1.5 se muestra la densidad de estados $N(E)$ obtenida de un potencial tipo Kronig-Penney [Ashcroft, 1976] para (a) una estructura cristalina y (b) una estructura amorfa con profundidades de pozo aleatorias. Obsérvese que en general la $N(E)$ tiene bordes bien definidos para el caso (a) cristalino y bordes suaves para el caso (b) amorfo. Esta última característica junto con la localización exponencial de la función de onda son las consecuencias más importantes del potencial tipo Kronig-Penney con pozos de profundidad aleatorios.

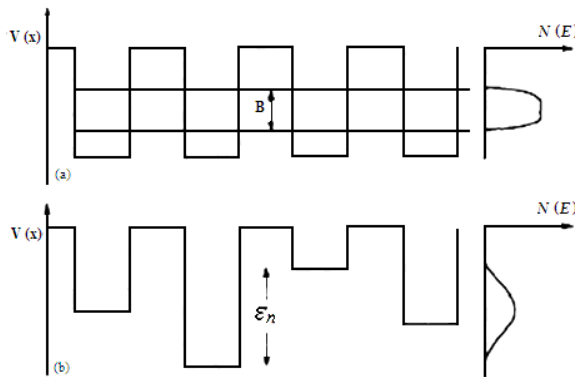


Figura 1.5 Densidad de estados $N(E)$ obtenida del potencial tipo Kronig-Penney para (a) una estructura cristalina y (b) una estructura amorfa.

Dado que los sistemas desordenados generalmente carecen de soluciones analíticas, éstos pueden considerarse como un sistema con muchas impurezas. A continuación, como ejemplo, se analiza la localización en una cadena periódica infinita de átomos de masa m y constantes de interacción entre vecinos más cercanos α . Dicha cadena contiene una sola impureza de masa M en el sitio $j=0$, como se muestra en la Figura 1.6.

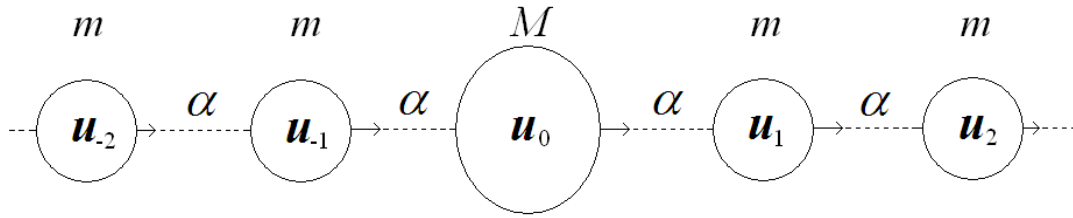


Figura 1.6 Cadena periódica de átomos con una impureza de masa M en el sitio $j=0$.

Las ecuaciones de movimiento para los desplazamientos de los átomos u_j con respecto a sus posiciones de equilibrio alrededor de la impureza son

$$\begin{cases} m\ddot{u}_{-1} = \alpha(u_0 + u_{-2} - 2u_{-1}) \\ M\ddot{u}_0 = \alpha(u_1 + u_{-1} - 2u_0) \\ m\ddot{u}_1 = \alpha(u_0 + u_2 - 2u_1) \end{cases} \quad (1.33)$$

Se propone una solución o un modo vibracional debido a la impureza de la siguiente forma

$$u_j = u_0 e^{-k|j| - i\omega t} \quad (1.34)$$

Al sustituir en las ecuaciones (1.33) tenemos

$$\begin{cases} -m\omega^2 = \alpha(e^k + e^{-k} - 2) \\ -M\omega^2 = \alpha(e^{-k} + e^{-k} - 2) \\ -m\omega^2 = \alpha(e^k + e^{-k} - 2) \end{cases}, \quad (1.35)$$

por lo que

$$k = \ln\left(1 - \frac{2m}{M}\right) \quad (1.36)$$

y

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sqrt{\frac{m/M}{2 - M/m}} \quad (1.37)$$

En resumen, la presencia de una impureza conduce a un modo vibracional que se localiza exponencialmente en el espacio. Para el caso de N_{imp} impurezas, el cual es mucho menor que el número total de átomos en la cadena, existen N_{imp} estados localizados.

En general, una forma de estudiar localización es por medio de la llamada probabilidad de retorno $P(\mathbf{r})$ definida por [Tiggelen, 1999]

$$P(\mathbf{r}) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \left| \langle \mathbf{r} | \exp(-i\hat{H}t) | \mathbf{r} \rangle \right|^2, \quad (1.38)$$

que da la densidad de probabilidad para una partícula que deja la posición \mathbf{r} para que finalmente regrese al mismo sitio. Se espera que esta cantidad sea casi cero para estados extendidos y sea distinto de cero para estados localizados, ya que en ausencia de difusión la probabilidad no se diluye en el sistema. Usando la descomposición espectral

$$\exp(-i\hat{H}t) = \sum_n \exp(-iE_n t) |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \quad (1.39)$$

donde $\hat{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$. Entonces,

$$P(\mathbf{r}) = \sum_n |\phi_n(\mathbf{r})|^4. \quad (1.40)$$

Se puede definir la razón de participación inversa (**IPR**) como

$$IPR(E_n) \equiv \sum_i |c_i(n)|^4, \quad (1.41)$$

siendo $|\phi_n\rangle = \sum_i c_i(n) |i\rangle$ e $|i\rangle$ es la función de Wannier centrada en el sitio i . Para el caso de excitaciones fonónicas, se tiene

$$IPR(\omega_n) \equiv \sum_i |u_i(n)|^4. \quad (1.42)$$

Otra forma de estudiar localización en un sistema desordenado es a través del coeficiente de Lyapunov (γ) que representa la tasa de decrecimiento de la función de onda relacionada con el inverso de la longitud de localización. En el caso de excitaciones vibracionales,

$$\gamma(N, \omega^2) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N} \ln \left[(\tilde{\tau}_{1,1})^2 + (\tilde{\tau}_{1,2})^2 + (\tilde{\tau}_{2,1})^2 + (\tilde{\tau}_{2,2})^2 \right] \quad (1.43)$$

donde $\tilde{\tau}_{1,1}$, $\tilde{\tau}_{1,2}$, $\tilde{\tau}_{2,1}$, $\tilde{\tau}_{2,2}$ son los elementos de matriz de transferencia $\tilde{\mathbf{T}}$ dada por la ecuación (B.14) en el apéndice B.

1.2.2 Teoría de Mott

En la década de los sesenta, Nevill Mott introdujo el concepto del borde de movilidad separando los estados extendidos de los estados localizados. Estos últimos aparecen en los bordes de la banda cuando la intensidad de desorden $\delta \equiv W/V$ es pequeña. Los bordes de movilidad se mueven gradualmente hacia el centro de la banda cuando aumenta δ , como puede verse en la Figura 1.7. Nótese que la zona de estados

extendidos se reduce al aumentar el valor de δ . Existe un valor crítico δ_c y para $\delta > \delta_c$ solamente existe estados localizados [Mott, 1990].

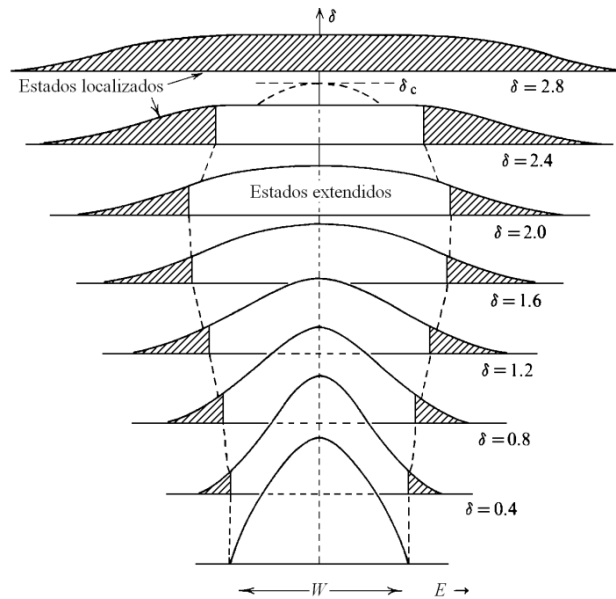


Figura 1.7 El parámetro de desorden δ , donde los estados localizados están indicados por las áreas sombreadas y son separados de los estados extendidos por los bordes de movilidad.

En esta sección hemos visto algunas formas del desorden estructural que se puede presentar en un sólido, así como su caracterización y las consecuencias en el comportamiento de las excitaciones tanto electrónica como fonónica. En la siguiente sección, se discutirá un tipo de desorden estructural cuasiperiódico y sus consecuencias en las propiedades de los cuasicristales.

1.3 Cuasicristales

En 1984, Dan Shechtman observó el primer cuasicristal en aleaciones de aluminio y manganeso solidificadas por enfriamiento rápido, reportando patrones de difracción electrónica que consistían en puntos bien definidos con una simetría icosaedra tridimensional prohibida por la cristalografía tradicional [Shechtman, 1984]. Posteriormente D. Levine y P. Steinhardt encontraron que las estructuras icosaedrales tienen una transformada de Fourier que coincide con el patrón de difracción observado y explicaron como la simetría icosaedra puede coexistir con el orden de largo alcance [Levine, 1984]. En la actualidad una de las características más importantes de los cuasicristales es que

tienen un orden orientacional de largo alcance, pero no una simetría traslacional.

Las aleaciones cuasicristalinas se pueden dividir principalmente en dos grandes grupos: icosaedrales y decagonales. Éste último grupo de cuasicristales está formado por un arreglo periódico en una dirección y cuasiperiódico en las dos direcciones restantes. Este arreglo cuasiperiódico bidimensional puede ser descrito por la red de Penrose, la cual está constituida de dos tipos de rombos equiláteros con uno de sus ángulos 36° y 72° respectivamente. Además, la red de Penrose se construye embonando los rombos equiláteros cuyos lados marcados con flechas negras y blancas tienen el mismo símbolo y sentido, como se muestra en la Figura 1.8. En este arreglo todos los enlaces se orientan en diez direcciones, por lo que tienen un orden direccional de largo alcance. Además la razón dorada [$\tau \equiv (\sqrt{5} + 1)/2$] está presente en el cociente de las áreas entre ambos rombos, así como en el cociente del número total de dichos rombos cuando la red es infinita.

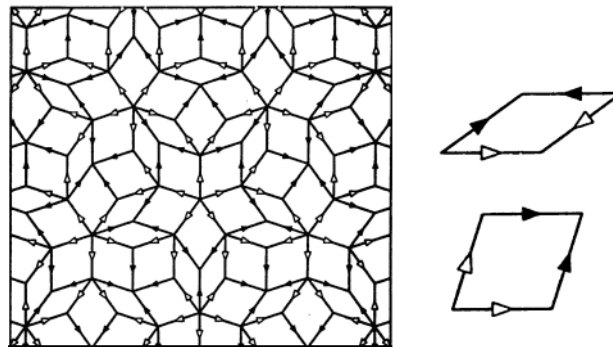


Figura 1.8 Red de Penrose y los dos rombos constituyentes con lados marcados por flechas blancas y negras para generar dicha red.

Históricamente la razón dorada fue introducida a través de los números de Fibonacci. Además, la red de Penrose es una extensión bidimensional directa de la secuencia de Fibonacci mediante los triángulos de Robinson [Naumis, 1994], es decir, se puede obtener la red de Penrose uniendo los triángulos -mitades de los rombos en la Figura 1.8- mediante la regla de adición que se presentará en la sección 1.4.2.

En la actualidad, la investigación de los cuasicristales podría clasificarse en dos grandes líneas: (1) las aleaciones cuasicristalinas con la cuasiperiodicidad a escala atómica; (2) las estructuras cuasiperiódicas artificialmente construidas o superredes

cuasiperiódicas. Estas últimas presentan cuasiperiodicidad en muy diferentes escalas que varían desde nanómetros hasta centímetros. Estas dos líneas de investigación serán discutidas en las próximas subsecciones.

1.3.1 Aleaciones cuasicristalinas

Las aleaciones cuasicristales pueden presentarse en forma metaestable o termodinámicamente estable. Éstas de acuerdo a su simetría estructural pueden ser icosaedrales, decagonal, entre otras. El primer cuasicristal producido por solidificación rápida es un ejemplo claro de una aleación icosaedrales metaestable. En 1986, Bancel y Heiney sintetizaron diversas aleaciones cuasicristalinas icosaedrales adicionando silicio o rutenio y lograron una mayor estabilidad de la fase cuasicristalina. Sus resultados indican que las pseudobrechas energéticas en la estructura de bandas electrónica toman un papel importante en la estabilización de la fase icosaedrales [Bancel, 1986].

Una aleación cuasicristal termodinámicamente estable es un material que puede sufrir tratamientos térmicos para su elaboración sin modificar su orden estructural cuasiperiódico. El primer cuasicristal estable fue la aleación $Al_{2.5}Li_{1.2}Cu_{0.7}Mg_{0.1}$ [Ball, 1985], en donde el litio estabiliza la aleación debido a su tamaño atómico. La segunda generación de cuasicristales icosaedrales estables fue encontrada en los sistemas $Zn-Mg-RE$, donde RE son tierras raras [Luo, 1993]. Estos cuasicristales tienen una excelente calidad estructural y poseen momentos magnéticos debido a los electrones $4f$ localizados en los átomos RE , en los cuales se puede estudiar el magnetismo en redes cuasiperiódicas. El primer cuasicristal decagonal está reportado en la aleación $Al-Mn$ junto con metales de transición (Fe , Cr y Rh) mostrando un aparente eje de simetría 10 junto con un orden orientacional de largo alcance y simetría translacional unidimensional [Bendersky, 1985].

Una forma de explicar la existencia de aleaciones cuasicristalinas estables es por el mecanismo empírico de Hume-Rothery, el cual sugiere que la estabilización de un material ocurre cuando su superficie de Fermi se intercepta o se encuentra muy cercana a la frontera de la zona de Brillouin. Otro parámetro importante para la formación preferencial de una estructura cuasicristalina es la razón electrón-por-átomo (e/a) [Matsuda, 2010]. En 1994, A. Tsai encontró una regla empírica para los cuasicristales icosaedrales estables de base- Al , es decir, $Al-Tm$ con

$e/a \approx 1.75$ y $Zn-Mn-Al$ con $e/a \approx 2.1$. Esto sugiere que los cuasicristales icosaedrales estables son aleaciones de Hume-Rothery.

1.3.2 Superredes cuasiperiódicas

Existen diferentes tipos de superredes construidas artificialmente en el laboratorio, por ejemplo, las superredes hechas de dos semiconductores donde la brecha energética de uno es significativamente menor que la brecha del otro. También existen superredes con más de dos materiales, así como superredes con diferentes tipos de dopaje alternando periódicamente semiconductores de tipo n y tipo p [Yu, 2005].

Puede existir superredes aperiódicas siguiendo una secuencia específica. Un ejemplo de superred cuasiperiódica es la de Fibonacci constituida por un orden cuasiperiódico en una dirección y un orden periódico en el plano perpendicular a esta dirección. Estos sistemas presentan propiedades no observadas en las estructuras periódicas o amorfas, por ejemplo, R. Merlin y colaboradores usaron por primera vez una superred de Fibonacci hecha de $GaAs$ y $AlAs$ para estudiar el patrón de dispersión Raman y de rayos X [Merlin, 1985] mostrando un espectro denso de picos que se pueden caracterizar por los índices de la red cuadrada, de la cual fue construida la red de Fibonacci [Todd, 1986]. Asimismo, el espectro Raman muestra características cuasiperiódicas de las excitaciones fonónicas que pueden ser predichas por la teoría microscópica basada en el modelo de Born-von Karman y las funciones de Green [Wang, 1988].

1.4 Redes de Fibonacci

La red cuasiperiódica más estudiada es quizás la de Fibonacci; dicha red puede variar en la naturaleza de los átomos y/o la interacción entre ellos, es decir, el problema de sitios, de enlace y mixto, como se muestra en la Figura 1.9.

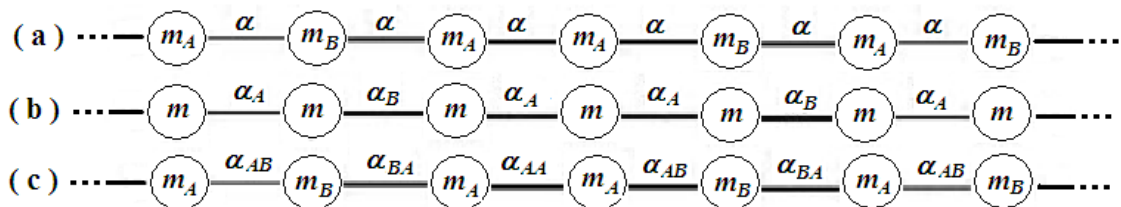


Figura 1.9 Redes de Fibonacci variando (a) la masa m en el problema de sitios, (b) la constante de interacción interatómica α en el problema de enlaces y (c) ambos en el problema mixto.

En particular, la red de Fibonacci fonónica estudiada en esta tesis tiene variaciones en los parámetros de las constantes de interacción interatómica (α_{ij}) entre los átomos vecinos más cercanos i y j . En la Figura 1.9(a) se tiene el problema de sitios, donde la cadena de átomos tiene las masas distintas m_A y m_B , siguiendo la secuencia de Fibonacci, con una única constante de interacción interatómica α entre vecinos más cercanos. Figura 1.9(b) muestra el problema de enlaces, en el cual el arreglo de la cadena está constituida de átomos iguales de masa m pero con constantes de interacción interatómica tomando los valores α_A y α_B siguiendo la secuencia de Fibonacci; mientras que en la Figura 1.9(c) se ilustra el problema mixto siendo una generalización del problema de sitios excepto que las constantes de interacción interatómica dependen de la naturaleza de los átomos vecino.

1.4.1 Definición de la cuasiperiodicidad

Las funciones cuasiperiódicas han sido estudiadas con anterioridad por los matemáticos [Besicovitch, 1932] y se definen a continuación. Sea $f(x)$ una función real ó compleja cuyo dominio son los números reales ($x \in \mathfrak{R}$), ésta es cuasiperiódica si y sólo si para todo $\varepsilon > 0$ existe un $\tau \in \mathfrak{R}$, tal que para todo x

$$|f(x+\tau) - f(x)| < \varepsilon; \quad (1.44)$$

en otras palabras, existe un cuasiperíodo τ , para el cual $f(x+\tau)$ se aproxima a $f(x)$ y la diferencia relativa entre estas dos es menor que ε . La desigualdad (1.44) tiene similitud con la de funciones uniformemente continuas, excepto que para las funciones cuasiperiódicas si ε decrece, el valor de τ se incrementa o tiende al infinito cuando ε es cero.

Una propiedad importante de las funciones cuasiperiódicas es su expansión en serie de Fourier de la siguiente forma

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{ir_n q_n x}, \quad (1.45)$$

donde r_n son números racionales y q_n son números reales linealmente independientes, es decir, si $r_1 q_1 + r_2 q_2 + \dots + r_n q_n = 0$ entonces $r_1 = r_2 = \dots = r_n = 0$.

Por otro lado, se puede introducir una función generadora $F(x_1, x_2, \dots)$ periódica en todas las variables x_i . Usando el teorema de Fourier, se tiene

$$F(x_1, x_2, \dots) \equiv \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{i r_n q_n x_n}; \quad (1.46)$$

por lo tanto, la función cuasiperiódica $f(x)$ es la diagonal de $F(x_1, x_2, \dots)$,

$$f(x) = \text{diag}[F(x_1, x_2, \dots)] = F(x, x, \dots). \quad (1.47)$$

En resumen, cualquier función cuasiperiódica puede siempre expresarse como la parte diagonal de una función generadora $F(x_1, x_2, \dots)$ periódica para cada una de sus variables con períodos posiblemente inconmensurados entre sí [Besicovitch, 1932].

1.4.2 Métodos de construcción

Existen tres métodos para construir la red de Fibonacci, ellos son:

(1) Método de adición. La secuencia de Fibonacci (F_n) de la generación n es una cadena de elementos A y B de acuerdo a la siguiente regla,

$$F_n = F_{n-1} \oplus F_{n-2}, \quad (1.48)$$

donde el símbolo \oplus es la suma directa denotando la unión de las cadenas de generación $n-1$ y $n-2$. Las condiciones iniciales son $F_1=A$ y $F_2=AB$. Se definen los números de Fibonacci [$N_F(n)$] como el número de elementos de la secuencia de Fibonacci en la generación n . De la ecuación (1.48) se tiene que

$$N_F(n) = N_F(n-1) + N_F(n-2), \quad (1.49)$$

siendo $N_F(1)=1$ y $N_F(2)=2$. Entonces, los números de Fibonacci constituyen una sucesión cuya razón de estos números $N_F(n+1)/N_F(n)$ converge a la razón dorada $\tau = (\sqrt{5}+1)/2$, ya que para $n \rightarrow \infty$ se tiene

$$x \equiv \frac{N_F(n+1)}{N_F(n)} = \frac{N_F(n) + N_F(n-1)}{N_F(n)} = 1 + \frac{1}{x}, \quad (1.50)$$

es decir,

$$x^2 - x - 1 = 0 \Rightarrow x = \frac{\sqrt{5}+1}{2} \equiv \tau \quad (1.51)$$

es la solución positiva.

(2) **Método de sustitución.** La secuencia de Fibonacci F_{n+1} se puede obtener de F_n aplicando las siguientes reglas de sustitución

$$A \rightarrow AB \quad y \quad B \rightarrow A. \quad (1.52)$$

De acuerdo con estas reglas se puede obtener la secuencia de Fibonacci mostrada en la Tabla 1.2.

Tabla 1.2 Secuencias de Fibonacci por el método de adición y el de sustitución.

| Generación | Método de adición | Método de sustitución |
|------------|---------------------------------|---|
| 1 | $F_1=A$ | $F_1=A$ |
| 2 | $F_2=AB$ | $F_2=AB$ |
| 3 | $F_3=AB \oplus A=ABA$ | $F_3=(AB)(A)=ABA$ |
| 4 | $F_4=ABA \oplus AB=ABAAB$ | $F_4=(AB)(A)(AB)=ABAAB$ |
| 5 | $F_5=ABAAB \oplus ABA=ABAABABA$ | $F_5=(AB)(A)(AB)(AB)(A)=ABAABABA$ |
| 6 | $F_6=ABAABABA \oplus ABAAB=...$ | $F_6=(AB)(A)(AB)(AB)(A)(AB)(A)(AB)=...$ |
| \vdots | \vdots | \vdots |

Se puede probar analíticamente que la secuencia de Fibonacci generada por los dos métodos anteriores son equivalentes definiendo un operador lineal \mathcal{G} , tal que

$$\mathcal{G}(xy) = \mathcal{G}(x) \oplus \mathcal{G}(y) \quad (1.53)$$

donde $\mathcal{G}^1(B) = A$ y $\mathcal{G}^1(A) = AB$. Aplicando el operador \mathcal{G} sucesivamente se tiene

$$\begin{aligned} F_1 &= \mathcal{G}^1(B) = A \\ F_2 &= \mathcal{G}^2(B) = \mathcal{G}^1(\mathcal{G}^1(B)) = \mathcal{G}^1(A) = AB \\ F_3 &= \mathcal{G}^3(B) = \mathcal{G}^2(\mathcal{G}^1(B)) = \mathcal{G}^2(A) = \mathcal{G}^1(\mathcal{G}^1(A)) = \mathcal{G}^1(AB) \\ &= \mathcal{G}^1(A) \oplus \mathcal{G}^1(B) = ABA \quad , (1.54) \\ &\vdots \\ F_n &= \mathcal{G}^n(B) = \mathcal{G}^{n-1}(\mathcal{G}^1(B)) = \mathcal{G}^{n-1}(A) = \mathcal{G}^{n-2}(\mathcal{G}^1(A)) = \mathcal{G}^{n-2}(AB) \\ &= \mathcal{G}^{n-2}(A) \oplus \mathcal{G}^{n-2}(B) = \mathcal{G}^{n-2}(\mathcal{G}^1(B)) \oplus \mathcal{G}^{n-2}(B) = \mathcal{G}^{n-1}(B) \oplus \mathcal{G}^{n-2}(B) \end{aligned}$$

es decir, $F_n = F_{n-1} \oplus F_{n-2}$. Por lo tanto, se tiene que el método de sustitución conduce al de adición.

(3) **Método de proyección.** La red de Fibonacci se puede construir a partir de la proyección de una red rectangular sobre una línea recta [Janot, 1994] cuyo tangente del ángulo θ respecto al eje horizontal es igual a la razón dorada τ como se muestra en la Figura 1.10.

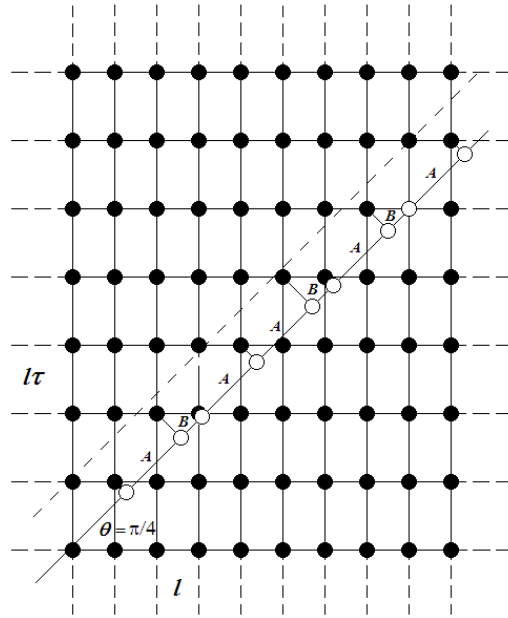


Figura 1.10 Método de proyección, cuando $\tan(\theta) = \tau$ se obtiene la secuencia de Fibonacci.

Los puntos de la red cuadrada están determinados por los vectores posición $\vec{R} = l\hat{x} + m\hat{y}$ donde l y m son números enteros, \hat{x} y \hat{y} son los vectores unitarios de la red cuadrada. Definiendo el operador \hat{P} que proyecta los puntos de la red hacia la recta de pendiente τ , es decir,

$$\hat{P}\hat{x} = \cos(\theta) = \frac{1}{\sqrt{1+\tau^2}} \quad \text{y} \quad \hat{P}\hat{y} = \sin(\theta) = \frac{\tau}{\sqrt{1+\tau^2}}. \quad (1.55)$$

Los puntos dentro de la banda con ancho vertical uno dentro de la línea punteada de la Figura 1.10 satisfacen la condición $m = \lceil l\tau \rceil$ donde $\lceil x \rceil$ es la función del entero mayor, es decir, si $x = 3.2 \Rightarrow \lceil x \rceil = 4$. Entonces, los puntos proyectados sobre la recta que se encuentran en la banda tienen la forma siguiente

$$R_l = \hat{P}\vec{R} = l\cos(\theta) + \lceil l\tau \rceil \sin(\theta) = \frac{l}{\sqrt{1+\tau^2}} + \frac{\tau \lceil l\tau \rceil}{\sqrt{1+\tau^2}}. \quad (1.56)$$

Definiendo un segmento largo $A \equiv \cos(\theta) + 2\sin(\theta)$ y un segmento corto $B \equiv \cos(\theta) + \sin(\theta)$, las distancias (ΔR_l) entre los puntos proyectados (R_l) se muestran en la Tabla 1.3.

Tabla 1.3 La red de Fibonacci generada por el método de proyección.

| l | R_l | ΔR_l | Segmento |
|----------|-----------------------------------|--------------------------------|----------|
| 1 | $\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$ | | |
| 2 | $2\cos(\theta) + 4\sin(\theta)$ | $\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$ | A |
| 3 | $3\cos(\theta) + 5\sin(\theta)$ | $\cos(\theta) + \sin(\theta)$ | B |
| 4 | $4\cos(\theta) + 7\sin(\theta)$ | $\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$ | A |
| 5 | $5\cos(\theta) + 9\sin(\theta)$ | $\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$ | A |
| 6 | $6\cos(\theta) + 10\sin(\theta)$ | $\cos(\theta) + \sin(\theta)$ | B |
| 7 | $7\cos(\theta) + 12\sin(\theta)$ | $\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$ | A |
| 8 | $8\cos(\theta) + 13\sin(\theta)$ | $\cos(\theta) + \sin(\theta)$ | B |
| 9 | $9\cos(\theta) + 15\sin(\theta)$ | $\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$ | A |
| 10 | $10\cos(\theta) + 17\sin(\theta)$ | $\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$ | A |
| 11 | $11\cos(\theta) + 18\sin(\theta)$ | $\cos(\theta) + \sin(\theta)$ | B |
| 12 | $12\cos(\theta) + 20\sin(\theta)$ | $\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$ | A |
| \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |

Nótese que el método de proyección es una aplicación de la ecuación (1.47) donde la función generadora correspondiente es $F(x, y)$ y tiene dos períodos, uno de valor unitario y el otro con valor de la razón dorada τ .

Capítulo 2 Excitaciones Fonónicas

En la mayoría de los experimentos, la medición se realiza sobre los estados excitados cuya energía se encuentra cercana a la del estado base. Dichos estados pueden describirse usando el lenguaje de excitaciones elementales, los cuales se pueden clasificar en dos conjuntos. En el primer conjunto, se tienen las cuasipartículas que corresponden a partículas individuales cuyos movimientos son modificados por las interacciones con las otras partículas del sistema. En el segundo conjunto tenemos excitaciones correspondientes a un movimiento colectivo del sistema. Estas excitaciones son llamadas modos colectivos, tales como fonones, magnones y plasmones.

En particular, la excitación fonónica se discutirá con detalle en este capítulo.

2.1 Modos Normales de Vibración

En los sólidos, las oscilaciones de los átomos alrededor de sus posiciones de equilibrio pueden ser descritas en términos de excitaciones elementales fonónicas. En un sólido tridimensional con N átomos de masa m y una interacción interatómica α constante entre vecinos más cercanos, existen $3N$ grados de libertad generándose $3N$ modos normales de vibración distribuidos en N modos longitudinales y $2N$ modos transversales. Para un sistema unidimensional, el hamiltoniano puede escribirse como

$$H = \sum_l \frac{p_l^2}{2m} + \frac{\alpha}{2} \sum_l (q_{l+1} - q_l)^2 \quad (2.1)$$

donde p_l y q_l son respectivamente el momento lineal y posición del átomo l , con una interacción interatómica α constante [Quilichini, 1997].

A continuación, se analizarán los modos normales para una cadena monoatómica y una diatómica.

Cadena monoatómica. Se considera N átomos idénticos de masa m separados por una distancia a con una interacción interatómica longitudinal α y una transversal β , como se muestran en las Figuras 2.1(a) y 2.1(b).

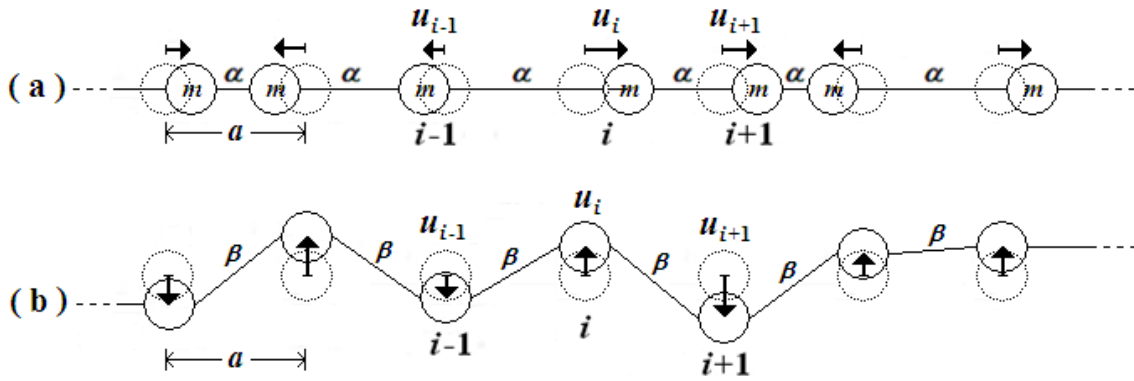


Figura 2.1 Vibraciones (a) longitudinal y (b) transversal, debidas a las interacciones interatómicas α y β . Los círculos punteados y continuos indican respectivamente las posiciones de equilibrio e instantáneas.

Sea $u_i(t) = q_i(t) - q_{i0}$ el desplazamiento del átomo i -ésimo con respecto a su posición de equilibrio (q_{i0}). Como ejemplo, se analizará el caso del desplazamiento longitudinal, cuyas ecuaciones de movimiento son

$$m\ddot{u}_i = \alpha[u_{i+1} - u_i] - \alpha[u_i - u_{i-1}]. \quad (2.2)$$

Al proponer una solución de la forma

$$u_i(t) = u_0 e^{i(kla - \omega t)}, \quad (2.3)$$

y sustituyendo la ecuación (2.3) en (2.2), se obtiene

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2\alpha[1 - \cos(ka)]}{m}} = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}} \left| \sin\left(\frac{1}{2}ka\right) \right|. \quad (2.4)$$

La curva de dispersión para este caso se muestra en la Figura 2.2, notando que cuando k es pequeña, ω es lineal en k [Ashcroft, 1976]

$$\omega(k) = a\sqrt{\frac{\alpha}{m}} |k|. \quad (2.5)$$

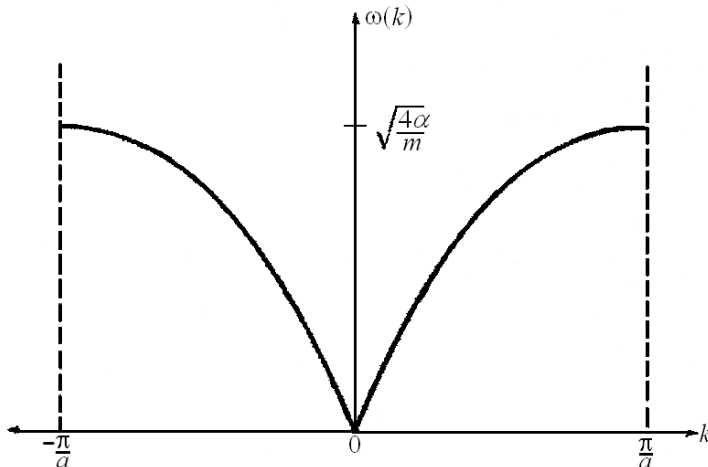


Figura 2.2 Curva de dispersión para la cadena monoatómica de interacción interatómica α entre vecinos más cercanos.

Cadena diatómica. Se considera una cadena de $2N$ átomos de masas m_1 y m_2 alternando sus posiciones en la cadena por una distancia $2a$ como se muestra en la Figura 2.3, donde α es la interacción interatómica entre los vecinos más cercanos.

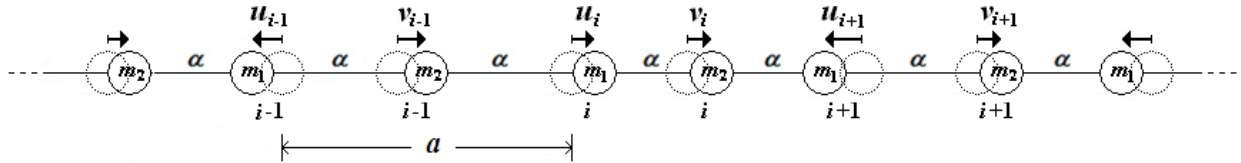


Figura 2.3 Vibraciones longitudinales en una cadena diatómica con átomos de masa m_1 y m_2 , donde los círculos punteados y continuos indican respectivamente las posiciones de equilibrio e instantáneos.

Sean respectivamente u_i y v_i los desplazamientos de los átomos de masa m_1 y m_2 con respecto a sus posiciones de equilibrio. Las ecuaciones de movimiento son

$$\begin{cases} m_1 \ddot{u}_{2n} = \alpha[v_{2n+1} - u_{2n}] - \alpha[u_{2n} - v_{2n-1}] \\ m_2 \ddot{v}_{2n+1} = \alpha[u_{2n+2} - v_{2n+1}] - \alpha[v_{2n+1} - u_{2n}] \end{cases} \quad (2.6)$$

cuyas soluciones son de la forma

$$u_l = Ae^{i(kla - \omega t)} \quad y \quad v_l = Be^{i(kla - \omega t)}, \quad (2.7)$$

y al sustituir la ecuación (2.7) en (2.6) se tiene que [Kittel, 1996]

$$\omega^2 = \alpha \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \pm \alpha \sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^2 - \frac{4}{m_1 m_2} \sin^2\left(\frac{1}{2}ka\right)}. \quad (2.8)$$

La Figura 2.4 muestra las soluciones $-$ y $+$ de la ecuación (2.8) que corresponden respectivamente las ramas acústica y óptica.

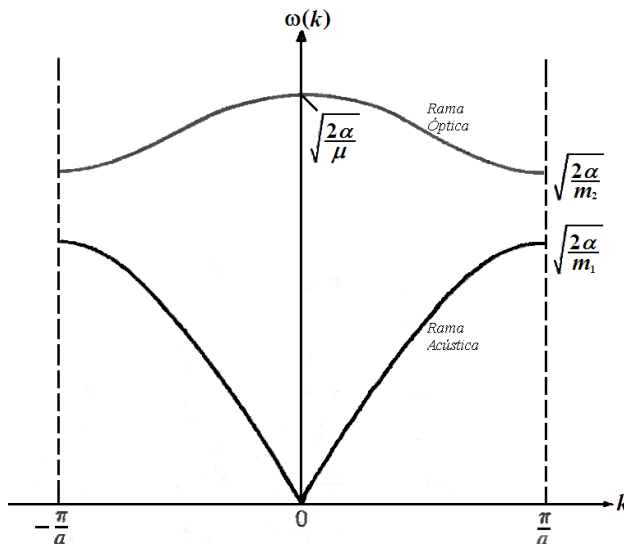


Figura 2.4 Relación de dispersión para una cadena diatómica con una razón de masas $m_1/m_2 = 5$, donde la masa reducida $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$.

Nótese que la frecuencia ω de la rama inferior o acústica tiende a cero para k pequeña ($k \ll \pi/a$) donde ω es proporcional al vector de onda k siendo la constante de proporcionalidad la velocidad de sonido del sistema. Mientras que la rama superior es la óptica, en la cual $\omega(k) \neq 0$ para $k=0$.

2.2 Operadores de Creación y Aniquilación

Se puede expresar el movimiento de los átomos usando las coordenadas generalizadas (q_l, p_l) dadas por [Goldstein, 1980]

$$q_l(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \left[A_k e^{i(kla-\omega t)} + A_k^* e^{-i(kla-\omega t)} \right] \quad (2.9)$$

y

$$p_l(t) \equiv m \dot{q}_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k im\omega \left[A_k^* e^{-i(kla-\omega t)} - A_k e^{i(kla-\omega t)} \right]. \quad (2.10)$$

Sea $\omega' \equiv \omega(k')$ y usando $\sum_l e^{-i(k-k')la} = N\delta_{k,k'}$, la energía cinética del hamiltoniano (2.1) es

$$\begin{aligned} \sum_l \frac{p_l^2}{2m} &= \sum_l \sum_k \sum_{k'} \frac{m\omega\omega'}{2N} \left[A_k e^{i(kla-\omega t)} - A_k^* e^{-i(kla-\omega t)} \right] \left[A_{k'}^* e^{-i(k'la-\omega' t)} - A_{k'} e^{i(k'la-\omega' t)} \right] \\ &= \sum_l \sum_k \sum_{k'} \frac{m\omega\omega'}{2N} \left[A_k^* e^{-i(kla-\omega t)} A_{k'} e^{i(k'la-\omega' t)} - A_k^* e^{-i(kla-\omega t)} A_{k'}^* e^{-i(k'la-\omega' t)} \right. \\ &\quad \left. + A_k e^{i(kla-\omega t)} A_{k'}^* e^{-i(k'la-\omega' t)} - A_k e^{i(kla-\omega t)} A_{k'} e^{i(k'la-\omega' t)} \right] \\ &= \sum_l \sum_k \sum_{k'} \frac{m\omega\omega'}{2N} \left[A_k^* A_{k'} e^{i(k'-k)la} e^{i(\omega-\omega')t} - A_k^* A_{k'}^* e^{-i(k+k')la} e^{i(\omega+\omega')t} \right. \\ &\quad \left. + A_k A_{k'}^* e^{i(k-k')la} e^{i(\omega'-\omega)t} - A_k A_{k'} e^{i(k+k')la} e^{-i(\omega+\omega')t} \right] \quad (2.11) \\ &= \sum_k \sum_{k'} \frac{m\omega\omega'}{2N} \left[A_k^* A_{k'} N\delta_{k,k'} e^{i(\omega-\omega')t} - A_k^* A_{k'}^* N\delta_{-k,k'} e^{i(\omega+\omega')t} \right. \\ &\quad \left. + A_k A_{k'}^* N\delta_{k,k'} e^{i(\omega'-\omega)t} - A_k A_{k'} N\delta_{-k,k'} e^{-i(\omega+\omega')t} \right] \\ &= \sum_k \frac{m\omega^2}{2} \left[A_k^* A_k + A_k A_k^* - A_k^* A_{-k} e^{2i\omega t} - A_k A_{-k} e^{-2i\omega t} \right] \end{aligned}$$

y su energía potencial es

$$\begin{aligned} \frac{\alpha}{2} \sum_l (q_{l+1} - q_l)^2 &= \sum_l \sum_k \sum_{k'} \frac{\alpha}{2N} \left[A_k e^{i(kla-\omega t)} (e^{ika} - 1) + A_k^* e^{-i(kla-\omega t)} (e^{-ika} - 1) \right] \times \\ &\quad \left[A_{k'} e^{i(k'la-\omega' t)} (e^{ik'a} - 1) + A_{k'}^* e^{-i(k'la-\omega' t)} (e^{-ik'a} - 1) \right] \quad (2.12) \end{aligned}$$

la cual puede reescribirse como

$$\begin{aligned}
\frac{\alpha}{2} \sum_l (q_{l+1} - q_l)^2 &= \sum_l \sum_k \sum_{k'} \frac{\alpha}{2N} \left[\begin{aligned} &A_k A_{k'} e^{i(k+k')la} e^{-i(\omega+\omega')t} (e^{ika} - 1)(e^{ik'a} - 1) \\ &+ A_k A_{k'}^* e^{i(k-k')la} e^{-i(\omega-\omega')t} (e^{ika} - 1)(e^{-ik'a} - 1) \\ &+ A_k^* A_{k'} e^{i(k'-k)la} e^{-i(\omega'-\omega)t} (e^{-ika} - 1)(e^{ik'a} - 1) \\ &+ A_k^* A_{k'}^* e^{-i(k+k')la} e^{i(\omega+\omega')t} (e^{-ika} - 1)(e^{-ik'a} - 1) \end{aligned} \right] \\
&= \sum_k \sum_{k'} \frac{\alpha}{2N} \left[\begin{aligned} &A_k A_{k'} N \delta_{-k,k'} e^{-i(\omega-\omega')t} (e^{ika} - 1)(e^{ik'a} - 1) \\ &+ A_k A_{k'}^* N \delta_{k,k'} e^{-i(\omega-\omega')t} (e^{ika} - 1)(e^{-ik'a} - 1) \\ &+ A_k^* A_{k'} N \delta_{k,k'} e^{-i(\omega'-\omega)t} (e^{-ika} - 1)(e^{ik'a} - 1) \\ &+ A_k^* A_{k'}^* N \delta_{-k,k'} e^{i(\omega+\omega')t} (e^{-ika} - 1)(e^{-ik'a} - 1) \end{aligned} \right], \tag{2.13}
\end{aligned}$$

es decir,

$$\begin{aligned}
\frac{\alpha}{2} \sum_l (q_{l+1} - q_l)^2 &= \sum_k \frac{\alpha}{2} (e^{ika} - 1)(e^{-ika} - 1) \left[A_k^* A_k + A_k A_k^* + A_k A_{-k} e^{-2i\omega t} + A_k^* A_{-k}^* e^{2i\omega t} \right] \\
&= \sum_k \frac{\alpha}{2} (2 - e^{-ika} - e^{ika}) \left[A_k^* A_k + A_k A_k^* + A_k A_{-k} e^{-2i\omega t} + A_k^* A_{-k}^* e^{2i\omega t} \right] \tag{2.14} \\
&= \sum_k \alpha [1 - \cos(ka)] \left[A_k^* A_k + A_k A_k^* + A_k A_{-k} e^{-2i\omega t} + A_k^* A_{-k}^* e^{2i\omega t} \right].
\end{aligned}$$

Entonces, el hamiltoniano (2.1) tiene la siguiente forma

$$\begin{aligned}
H &= \sum_k \frac{m\omega^2}{2} \left[A_k^* A_k + A_k A_k^* - A_k^* A_{-k}^* e^{2i\omega t} - A_k A_{-k} e^{-2i\omega t} \right] \\
&\quad + \sum_k \alpha [1 - \cos(ka)] \left[A_k^* A_k + A_k A_k^* + A_k A_{-k} e^{-2i\omega t} + A_k^* A_{-k}^* e^{2i\omega t} \right]. \tag{2.15}
\end{aligned}$$

Usando la relación de dispersión (2.4), el hamiltoniano (2.15) se reescribe como

$$H = \sum_k m\omega^2(k) \left[A_k^* A_k + A_k A_k^* \right]. \tag{2.16}$$

Introduciendo las variables adimensionales

$$a_k = A_k \sqrt{\frac{2m\omega(k)}{\hbar}}, \tag{2.17}$$

el hamiltoniano (2.16) se convierte a

$$H = \sum_k \frac{\hbar\omega(k)}{2} \left[a_k^* a_k + a_k a_k^* \right]. \tag{2.18}$$

Por otro lado, las ecuaciones (2.9) y (2.10) conducen a

$$A_k = \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_l \left[q_l(t) + \frac{i}{m\omega} p_l(t) \right] e^{-i(kla-\omega t)} \quad (2.19)$$

y

$$A_k^* = \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_l \left[q_l(t) - \frac{i}{m\omega} p_l(t) \right] e^{i(kla-\omega t)}. \quad (2.20)$$

Ahora se introducen los operadores cuánticos $p_k \rightarrow \hat{p}_k \equiv -i\hbar \partial / \partial q_k$ entonces $[q_k, \hat{p}_{k'}] \equiv q_k \hat{p}_{k'} - \hat{p}_{k'} q_k = i\hbar \delta_{k,k'}$. Usando la ecuación (2.17), las ecuaciones (2.19) y (2.20) queda como

$$\hat{a}_k = \sqrt{\frac{m\omega}{2N\hbar}} \sum_l \left[q_l(t) + \frac{i}{m\omega} \hat{p}_l(t) \right] e^{-i(kla-\omega t)} \quad (2.21)$$

y

$$\hat{a}_k^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2N\hbar}} \sum_l \left[q_l(t) - \frac{i}{m\omega} \hat{p}_l(t) \right] e^{i(kla-\omega t)}, \quad (2.22)$$

ya que $\hat{p}^\dagger = \hat{p}$ es un operador hermitiano. El conmutador

$$\begin{aligned} [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] &\equiv \hat{a}_k \hat{a}_{k'}^\dagger - \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k \\ &= \frac{m\sqrt{\omega\omega'}}{2N\hbar} \sum_l \sum_{l'} e^{i(k'l'-kl)a} \left[q_l(t) + \frac{i}{m\omega} \hat{p}_l(t) \right] \left[q_{l'}(t) - \frac{i}{m\omega'} \hat{p}_{l'}(t) \right] \\ &\quad - \frac{m\sqrt{\omega\omega'}}{2N\hbar} \sum_l \sum_{l'} e^{i(k'l'-kl)a} \left[q_{l'}(t) - \frac{i}{m\omega'} \hat{p}_{l'}(t) \right] \left[q_l(t) + \frac{i}{m\omega} \hat{p}_l(t) \right] \\ &= -\frac{i\sqrt{\omega\omega'}}{2N\hbar} \sum_l \sum_{l'} e^{i(k'l'-kl)a} \left\{ \frac{1}{\omega} [q_{l'}(t), \hat{p}_l(t)] + \frac{1}{\omega'} [q_l(t), \hat{p}_{l'}(t)] \right\} \\ &= -\frac{i\sqrt{\omega\omega'}}{2N\hbar} \sum_l \sum_{l'} e^{i(k'l'-kl)a} \left\{ \frac{1}{\omega} i\hbar \delta_{l,l'} + \frac{1}{\omega'} i\hbar \delta_{l,l'} \right\} \\ &= \frac{\sqrt{\omega\omega'}}{2N} \sum_l e^{i(k'-k)la} \left\{ \frac{1}{\omega} + \frac{1}{\omega'} \right\} = \frac{\sqrt{\omega\omega'}}{2N} \left\{ \frac{1}{\omega} + \frac{1}{\omega'} \right\} N \delta_{k,k'} = \delta_{k,k'} \end{aligned} \quad (2.23)$$

donde \hat{a}_k y \hat{a}_k^\dagger se conocen como los operadores de aniquilación y creación fonónicos, respectivamente. Por lo tanto,

$$\hat{H} = \sum_k \hbar \omega(k) \left[\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2} \right] \quad (2.24)$$

es el hamiltoniano (2.18) en el formalismo de segunda cuantización.

2.3 Potencial de Born-von Karman

Las vibraciones de una red de átomos de masa $M(i)$ con desplazamiento $u_\mu(i)$ respecto a su posición de equilibrio $\mathbf{R}(i)$ pueden ser descritas a través del hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,\mu} \frac{p_\mu(i)^2}{M(i)} + \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu,i,j} \Phi_{\mu\nu}(i,j) u_\mu(i) u_\nu(j), \quad (2.25)$$

donde $\Phi_{\mu\nu}(i,j)$ es la matriz dinámica, μ especifica una de las tres coordenadas cartesianas del átomo i [Elliott, 1974].

Para el modelo de Born-von Karman con fuerzas centrales y no centrales entre vecinos más cercanos, la energía potencial de interacción es

$$\begin{aligned} V &= \sum_{i<j} V_{ij} = \sum_{i<j} \left\{ \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \{ [\mathbf{u}(i) - \mathbf{u}(j)] \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij} \}^2 + \frac{1}{2}\beta |\mathbf{u}(i) - \mathbf{u}(j)|^2 \right\}, \\ &= \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \sum_{i<j} \{ [\mathbf{u}(i) - \mathbf{u}(j)] \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij} \}^2 + \frac{1}{2}\beta \sum_{i<j} |\mathbf{u}(i) - \mathbf{u}(j)|^2 \end{aligned} \quad (2.26)$$

siendo $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ el vector unitario a lo largo de $\mathbf{R}(i) - \mathbf{R}(j)$ entre vecinos cercanos, α y β son las constantes de fuerza central y no central, respectivamente [Barrio, 1984].

Así, la matriz dinámica $[\Phi_{\mu\nu}(i,j)]$ definida como la segunda derivada con respecto a las componentes cartesianas de los desplazamientos del potencial de interacción (V) es

$$\Phi_{\mu\nu}(i,j) = \frac{\partial^2 V}{\partial u_\mu(i) \partial u_\nu(j)}. \quad (2.27)$$

Entonces la ecuación de movimiento derivada de la ecuación de Hamilton [Goldstein, 1980]

$$\dot{p}_\mu(i) = \frac{\partial H}{\partial u_\mu(i)}, \quad (2.28)$$

resulta ser de la forma

$$M(i) \ddot{u}_\mu(i) = - \sum_{j,\nu} \Phi_{\mu\nu}(i,j) u_\nu(j), \quad (2.29)$$

donde $M(i)$ es la masa inercial del átomo i . Para el caso $u \sim e^{-i\omega t}$, la ecuación (2.29) se convierte a

$$M(i)\omega^2 u_\mu(i) - \sum_{j,v} \Phi_{\mu\nu}(i,j) u_\nu(j) = 0. \quad (2.30)$$

En particular, la matriz dinámica de la ecuación (2.27) entre los átomos i y j en una red cúbicamente estructurada puede escribirse como

$$\Phi(i,j) = - \begin{pmatrix} (\alpha - \beta)(\hat{r}_{ij})_x(\hat{r}_{ij})_x + \beta & (\alpha - \beta)(\hat{r}_{ij})_x(\hat{r}_{ij})_y & (\alpha - \beta)(\hat{r}_{ij})_x(\hat{r}_{ij})_z \\ (\alpha - \beta)(\hat{r}_{ij})_x(\hat{r}_{ij})_y & (\alpha - \beta)(\hat{r}_{ij})_y(\hat{r}_{ij})_y + \beta & (\alpha - \beta)(\hat{r}_{ij})_y(\hat{r}_{ij})_z \\ (\alpha - \beta)(\hat{r}_{ij})_x(\hat{r}_{ij})_z & (\alpha - \beta)(\hat{r}_{ij})_y(\hat{r}_{ij})_z & (\alpha - \beta)(\hat{r}_{ij})_z(\hat{r}_{ij})_z + \beta \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

Como un ejemplo del potencial de Born-von Karman, analizaremos una red de 8 átomos idénticos de masa M como se muestra en la Figura 2.5.

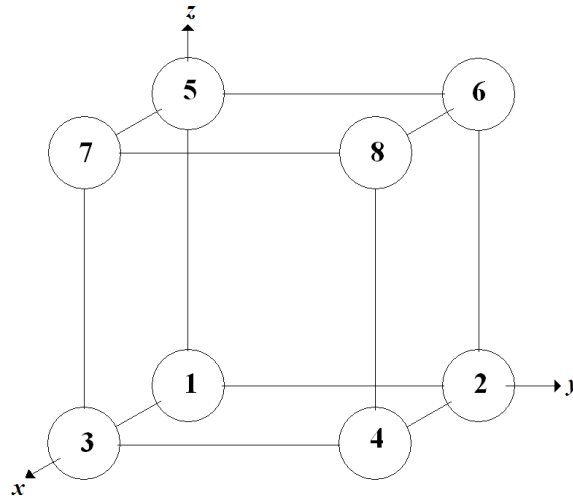


Figura 2.5 Una red de 8 átomos idénticos y numerados dentro de los círculos.

Usando la ecuación (2.31), su matriz dinámica tiene la siguiente forma

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_0 & \phi_y & \phi_x & 0 & \phi_z & 0 & 0 & 0 \\ \phi_y & \phi_0 & 0 & \phi_x & 0 & \phi_z & 0 & 0 \\ \phi_x & 0 & \phi_0 & \phi_y & 0 & 0 & \phi_z & 0 \\ 0 & \phi_x & \phi_y & \phi_0 & 0 & 0 & 0 & \phi_z \\ \phi_z & 0 & 0 & 0 & \phi_0 & \phi_y & \phi_x & 0 \\ 0 & \phi_z & 0 & 0 & \phi_y & \phi_0 & 0 & \phi_x \\ 0 & 0 & \phi_z & 0 & \phi_x & 0 & \phi_0 & \phi_y \\ 0 & 0 & 0 & \phi_z & 0 & \phi_x & \phi_y & \phi_0 \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

siendo

$$\phi_x = - \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{pmatrix}, \quad (2.33)$$

de 8×8 representando los modos en cada dirección cartesiana. La separabilidad de la matriz dinámica en estas submatrices se analizará con detalle en la sección 2.5.

2.4 Método de Renormalización

La idea de renormalización fue introducida originalmente por Leo P. Kadanoff a través de bloques, es decir, agrupar un número de átomos formando un bloque y agrupa el mismo número de bloques para formar un nuevo bloque; así sucesivamente para abordar un sistema macroscópico de átomos [Kadanoff, 1967]. Posteriormente esta idea fue generalizada por Kenneth Wilson para analizar los fenómenos críticos [Wilson, 1971], el cual fue galardonado con el Premio Nobel de Física en 1982.

En general, el método de renormalización en el espacio real consiste en reducir el número de grados de libertad de un sistema conservando la información física contenida en él para poder describir sus propiedades macroscópicas. A continuación, se introducen las ideas básicas del método analizando el sistema unidimensional.

Tabla 2.1 Número de enlaces para una cadena de Fibonacci.

| Generación | No. Enlaces | Generación | No. Enlaces |
|------------|-------------|------------|-------------|
| 1 | 1 | 21 | 17711 |
| 2 | 2 | 22 | 28657 |
| 3 | 3 | 23 | 46368 |
| 4 | 5 | 24 | 75025 |
| 5 | 8 | 25 | 121393 |
| 6 | 13 | 26 | 196418 |
| 7 | 21 | 27 | 317811 |
| 8 | 34 | 28 | 514229 |
| 9 | 55 | 29 | 832040 |
| 10 | 89 | 30 | 1346269 |
| 11 | 144 | 31 | 2178309 |
| 12 | 233 | 32 | 3524578 |
| 13 | 377 | 33 | 5702887 |
| 14 | 610 | 34 | 9227465 |
| 15 | 987 | 35 | 14930352 |
| 16 | 1597 | 36 | 24157817 |
| 17 | 2584 | 37 | 39088169 |
| 18 | 4181 | 38 | 63245986 |
| 19 | 6765 | 39 | 102334155 |
| 20 | 10946 | 40 | 165580141 |

Consideremos una cadena de átomos cuyo ordenamiento de sus enlaces siguen la secuencia de Fibonacci, donde existen dos tipos de interacciones interatómicas parametrizadas por α_A y α_B para los modos longitudinales (LM), es decir, la dirección de propagación de onda coincide con la del desplazamiento atómico. La primera generación de la cadena de Fibonacci está formada por 2 átomos unidos por la interacción α_A y la segunda generación está formada por 3 átomos unidos por los enlaces α_A y α_B . Como se discutió en la sección 1.4.2., las generaciones sucesivas se construyen a partir de la relación de recurrencia (1.48) dada por $F_n = F_{n-1} \oplus F_{n-2}$, donde F_n es la secuencia de Fibonacci de la generación n . La Tabla 2.1 se resume el número de enlaces para las primeras 40 generaciones del problema de enlaces, donde el número de átomos es siempre el número de enlaces más uno.

A continuación discutiremos en detalle el proceso de renormalización en el espacio real eliminando las coordenadas del átomo interior de las ecuaciones de movimiento. Por ejemplo, la generación 2 tiene 3 átomos con interacciones a primeros vecinos, por lo que la ecuación de Dyson (A.3) asociada a este sistema es

$$(z\mathbf{I}-\mathbf{H})\mathbf{G}(z)=\begin{pmatrix} z-\varepsilon_1 & -\alpha_A & 0 \\ -\alpha_A & z-\varepsilon_2 & -\alpha_B \\ 0 & -\alpha_B & z-\varepsilon_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} G_{1,1}^{(2)}(z) & G_{1,2}^{(2)}(z) & G_{1,3}^{(2)}(z) \\ G_{2,1}^{(2)}(z) & G_{2,2}^{(2)}(z) & G_{2,3}^{(2)}(z) \\ G_{3,1}^{(2)}(z) & G_{3,2}^{(2)}(z) & G_{3,3}^{(2)}(z) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.39)$$

donde $G_{i,j}^{(2)}(z)$ representa el elemento de matriz ij de la función de Green correspondiente a la generación 2 de la cadena de Fibonacci. Asimismo, para el caso de fonones

$$z = m\omega^2 + i\eta, \varepsilon_1 = \alpha_A, \varepsilon_2 = \alpha_A + \alpha_B, \varepsilon_3 = \alpha_B, \quad (2.40)$$

mientras para electrones

$$z = E + i\eta, \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 0, t_A \text{ y } t_B \text{ en lugar de } \alpha_A \text{ y } \alpha_B. \quad (2.41)$$

Al desarrollar la multiplicación de las matrices, se obtiene las 9 ecuaciones que se puede resumir de la forma siguiente

$$(z - \varepsilon_1)G_{1,l}^{(2)}(z) - \alpha_A G_{2,l}^{(2)}(z) = \delta_{1,l}, \quad (2.42)$$

$$(z - \varepsilon_2)G_{2,l}^{(2)}(z) - \alpha_A G_{1,l}^{(2)}(z) - \alpha_B G_{3,l}^{(2)}(z) = \delta_{2,l}, \quad (2.43)$$

$$(z - \varepsilon_3)G_{3,l}^{(2)}(z) - \alpha_B G_{2,l}^{(2)}(z) = \delta_{3,l}, \quad (2.44)$$

donde $l=1, 2$ ó 3 y $\delta_{i,j}$ es la delta de Kronecker. Al sustituir la ecuación (2.43) en las ecuaciones (2.42) y (2.44) se obtienen

$$(z - \varepsilon_1)G_{1,l}^{(2)}(z) - \frac{\alpha_A^2}{(z - \varepsilon_2)}G_{1,l}^{(2)}(z) - \frac{\alpha_A \alpha_B}{(z - \varepsilon_2)}G_{3,l}^{(2)}(z) = \delta_{1,l} + \frac{\alpha_A}{(z - \varepsilon_2)}\delta_{2,l}, \quad (2.45)$$

$$(z - \varepsilon_3)G_{3,l}^{(2)}(z) - \frac{\alpha_B^2}{(z - \varepsilon_2)}G_{3,l}^{(2)}(z) - \frac{\alpha_A \alpha_B}{(z - \varepsilon_2)}G_{1,l}^{(2)}(z) = \delta_{3,l} + \frac{\alpha_B}{(z - \varepsilon_2)}\delta_{2,l}. \quad (2.46)$$

De las ecuaciones anteriores se puede identificar $\varepsilon_1 + \alpha_A^2/(z - \varepsilon_2)$ como la nueva autoenergía del sitio izquierdo $E_L(z, 2)$, $\varepsilon_3 + \alpha_B^2/(z - \varepsilon_2)$ como la del sitio derecho $E_R(z, 2)$ y $\alpha_A \alpha_B/(z - \varepsilon_2)$ como la nueva constante de interacción $\alpha(z, 2)$ entre los sitios extremos. Además, l toma únicamente los valores 1 o 3, por lo que $\delta_{2,l} = 0$. De esta forma, la ecuación (2.39) se puede reescribir como

$$\begin{pmatrix} z - E_L(z, 2) & -\alpha(z, 2) \\ -\alpha(z, 2) & z - E_R(z, 2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{1,1}^{(2)}(z) & G_{1,3}^{(2)}(z) \\ G_{1,3}^{(2)}(z) & G_{3,3}^{(2)}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.47)$$

con $E_L(z, 2) = \varepsilon_1 + \alpha_A^2/(z - \varepsilon_2)$, $E_R(z, 2) = \varepsilon_3 + \alpha_B^2/(z - \varepsilon_2)$ y $\alpha(z, 2) = \alpha_A \alpha_B/(z - \varepsilon_2)$.

En general, la ecuación de Dyson para la generación n a partir de las generaciones $n-1$ y $n-2$ estará dada por

$$\begin{pmatrix} z - E_L(z, n-1) & -\alpha(z, n-1) & 0 \\ -\alpha(z, n-1) & z - E_M(z, n) & -\alpha(z, n-2) \\ 0 & -\alpha(z, n-2) & z - E_R(z, n-2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{L,L}^{(n)}(z) & G_{L,M}^{(n)}(z) & G_{L,R}^{(n)}(z) \\ G_{M,L}^{(n)}(z) & G_{M,M}^{(n)}(z) & G_{M,R}^{(n)}(z) \\ G_{R,L}^{(n)}(z) & G_{R,M}^{(n)}(z) & G_{R,R}^{(n)}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.48)$$

donde $E_M(z, n) = E_R(z, n-1) + E_L(z, n-2)$ representa la autoenergía del sitio medio para el problema de enlaces. Aplicando el mismo procedimiento como el caso de la generación 2, la ecuación de Dyson (2.48) se reescribe de la forma siguiente

$$\begin{pmatrix} z - E_L(z, n) & -\alpha(z, n) \\ -\alpha(z, n) & z - E_R(z, n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{L,L}^{(n)}(z) & G_{L,R}^{(n)}(z) \\ G_{R,L}^{(n)}(z) & G_{R,R}^{(n)}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.49)$$

siendo

$$E_L(z, n) = E_L(z, n-1) + \frac{[\alpha(z, n-1)]^2}{z - E_M(z, n)}, \quad (2.50)$$

$$E_R(z, n) = E_R(z, n-2) + \frac{[\alpha(z, n-2)]^2}{z - E_M(z, n)} \quad (2.51)$$

y

$$\alpha(z, n) = \frac{\alpha(z, n-1)\alpha(z, n-2)}{z - E_M(z, n)}. \quad (2.52)$$

Las condiciones iniciales son $E_L(z, 1) = E_R(z, 1) = \alpha(z, 1) = \alpha_A$, $E_L(z, 2) = \alpha_A + \alpha_A^2/(z - \varepsilon_2)$, $E_R(z, 2) = \alpha_B + \alpha_B^2/(z - \varepsilon_2)$ y $\alpha(z, 2) = \alpha_A \alpha_B / (z - \varepsilon_2)$.

Para los sistemas no cristalinos el concepto del espacio recíproco carece de utilidad, ya que no existe simetría traslacional. En consecuencia, una de las formas de estudiar dichos sistemas es a través de la densidad de estados como función de la energía [$DOS(E)$], la cual es una medida de la degeneración en cada energía. Usando la ecuación (A.10), la $DOS(E)$ se relaciona con la función de Green de la forma

$$DOS(E, n) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\text{Im Tr } \mathbf{G}^{(n)}(z) \right] = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\text{Im} \sum_j G_{j,j}^{(n)}(E + i\eta) \right], \quad (2.53)$$

donde $G_{j,j}^{(n)}(z)$ son los elementos diagonales de la función de Green y $E = m\omega^2$ para el caso de fonones. En general, $\text{Tr}[\mathbf{G}^{(n)}(z)]$ se puede expresar como una función de los sitios extremos, $G_{L,L}^{(n)}$ y $G_{R,R}^{(n)}$, así como del elemento fuera de la diagonal $G_{L,R}^{(n)}$, dada por la ecuación

$$DOS(E, n) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \left[A(z, n)G_{L,L}^{(n)}(z) + B(z, n)G_{R,R}^{(n)}(z) + C(z, n)G_{L,R}^{(n)}(z) + D(z, n) \right] \quad (2.54)$$

donde $A(z, n)$, $B(z, n)$, $C(z, n)$ y $D(z, n)$ se determinan usando las siguientes relaciones de recurrencia obtenidas en el apéndice C,

$$A(z, n) = A(z, n-1) + \Theta(z, n)[\theta_1(z, n)]^2 + C(z, n-1)\theta_1(z, n), \quad (2.55)$$

$$B(z, n) = B(z, n-2) + \Theta(z, n)[\theta_2(z, n)]^2 + C(z, n-2)\theta_2(z, n), \quad (2.56)$$

$$C(z, n) = C(z, n-1)\theta_2(z, n) + C(z, n-2)\theta_1(z, n) + 2\Theta(z, n)\theta_1(z, n)\theta_2(z, n), \quad (2.57)$$

$$D(z, n) = D(z, n-1) + D(z, n-2) + \Theta(z, n)\theta_0(z, n), \quad (2.58)$$

siendo $\theta_0(z, n) = 1/[z - E_M(z, n)]$, $\theta_1(z, n) = \alpha(z, n-1)\theta_0(z, n)$, $\theta_2(z, n) = \alpha(z, n-2)\theta_0(z, n)$ y $\Theta(z, n) = A(z, n-2) + B(z, n-1) - 1$. Las condiciones iniciales son

$$A(z, 1) = B(z, 1) = 1, \quad C(z, 1) = D(z, 1) = 0, \quad (2.59)$$

$$\begin{aligned} A(z, 2) &= 1 + \alpha_A^2/[z - \varepsilon_2]^2, & B(z, 2) &= 1 + \alpha_B^2/[z - \varepsilon_2]^2, \\ C(z, 2) &= \alpha_A \alpha_B/[z - \varepsilon_2]^2, & D(z, 2) &= 1/[z - \varepsilon_2]. \end{aligned} \quad (2.60)$$

A continuación se extiende el proceso de renormalización anterior a cadenas con 2 átomos por celda. Por ejemplo, la generación 2 de la cadena de Fibonacci tiene 3 celdas con un total de 6 átomos que interactúan entre sí a primeros vecinos, como se muestra en la Figura 2.6

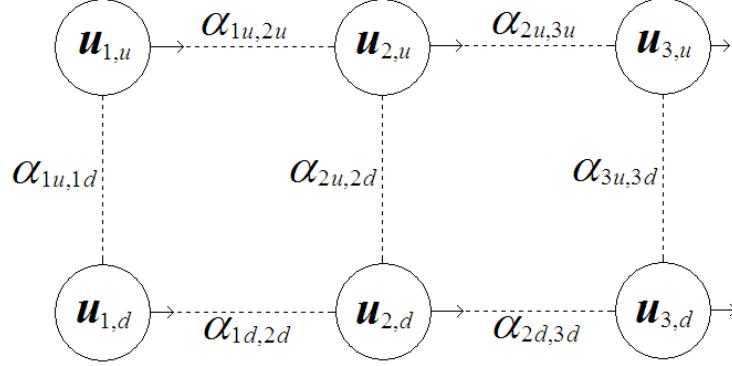


Figura 2.6 Representación esquemática de una red tipo escalera de 6 átomos, donde las cadenas superior e inferior se identifican, respectivamente, por u y d .

La función de Green en forma matricial para este sistema puede escribirse como

$$\mathbf{G}(z) = \begin{pmatrix} G_{1u,1u}^{(2)}(z) & G_{1u,1d}^{(2)}(z) & G_{1u,2u}^{(2)}(z) & G_{1u,2d}^{(2)}(z) & G_{1u,3u}^{(2)}(z) & G_{1u,3d}^{(2)}(z) \\ G_{1d,1u}^{(2)}(z) & G_{1d,1d}^{(2)}(z) & G_{1d,2u}^{(2)}(z) & G_{1d,2d}^{(2)}(z) & G_{1d,3u}^{(2)}(z) & G_{1d,3d}^{(2)}(z) \\ G_{2u,1u}^{(2)}(z) & G_{2u,1d}^{(2)}(z) & G_{2u,2u}^{(2)}(z) & G_{2u,2d}^{(2)}(z) & G_{2u,3u}^{(2)}(z) & G_{2u,3d}^{(2)}(z) \\ G_{2d,1u}^{(2)}(z) & G_{2d,1d}^{(2)}(z) & G_{2d,2u}^{(2)}(z) & G_{2d,2d}^{(2)}(z) & G_{2d,3u}^{(2)}(z) & G_{2d,3d}^{(2)}(z) \\ G_{3u,1u}^{(2)}(z) & G_{3u,1d}^{(2)}(z) & G_{3u,2u}^{(2)}(z) & G_{3u,2d}^{(2)}(z) & G_{3u,3u}^{(2)}(z) & G_{3u,3d}^{(2)}(z) \\ G_{3d,1u}^{(2)}(z) & G_{3d,1d}^{(2)}(z) & G_{3d,2u}^{(2)}(z) & G_{3d,2d}^{(2)}(z) & G_{3d,3u}^{(2)}(z) & G_{3d,3d}^{(2)}(z) \end{pmatrix}, \quad (2.61)$$

$$= \begin{pmatrix} \mathbf{g}_{1,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{1,2}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{1,3}^{(2)}(z) \\ \mathbf{g}_{2,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{2,2}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{2,1}^{(2)}(z) \\ \mathbf{g}_{3,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{3,2}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{3,3}^{(2)}(z) \end{pmatrix}$$

donde el superíndice entre paréntesis indica la generación de Fibonacci, en el subíndice de $G_{iu,jd}^{(2)}(z)$ i y j representan las celdas mientras que u (*up*) y d (*down*) señala la posición atómica dentro de las celdas. Asimismo, la matriz $\mathbf{G}(z)$ puede expresarse como una matriz de las submatrices

$$\mathbf{g}_{i,j}^{(2)}(z) \equiv \begin{pmatrix} G_{iu,ju}^{(2)}(z) & G_{iu,jd}^{(2)}(z) \\ G_{id,ju}^{(2)}(z) & G_{id,jd}^{(2)}(z) \end{pmatrix}. \quad (2.62)$$

Por otro lado, el hamiltoniano en forma matricial es

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{1u} & \alpha_{1u,1d} & \alpha_{1u,2u} & \alpha_{1u,2d} & 0 & 0 \\ \alpha_{1d,1u} & \varepsilon_{1d} & \alpha_{1d,2u} & \alpha_{1d,2d} & 0 & 0 \\ \alpha_{2u,1u} & \alpha_{2u,1d} & \varepsilon_{2u} & \alpha_{2u,2d} & \alpha_{2u,3u} & \alpha_{2u,3d} \\ \alpha_{2d,1u} & \alpha_{2d,1d} & \alpha_{2d,2u} & \varepsilon_{2d} & \alpha_{2d,3u} & \alpha_{2d,3d} \\ 0 & 0 & \alpha_{3u,2u} & \alpha_{3u,2d} & \varepsilon_{3u} & \alpha_{3u,3d} \\ 0 & 0 & \alpha_{3d,2u} & \alpha_{3d,2d} & \alpha_{3d,3u} & \varepsilon_{3d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_1 & \mathbf{a}_{1,2} & \mathbf{0} \\ \mathbf{a}_{2,1} & \boldsymbol{\varepsilon}_2 & \mathbf{a}_{2,3} \\ \mathbf{0} & \mathbf{a}_{3,2} & \boldsymbol{\varepsilon}_3 \end{pmatrix}, \quad (2.63)$$

donde las autoenergías y las interacciones matriciales están dadas por

$$\boldsymbol{\varepsilon}_j \equiv \begin{pmatrix} \varepsilon_{ju} & \alpha_{ju,jd} \\ \alpha_{jd,ju} & \varepsilon_{jd} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{a}_{i,j} \equiv \begin{pmatrix} \alpha_{iu,ju} & \alpha_{iu,jd} \\ \alpha_{id,ju} & \alpha_{id,jd} \end{pmatrix}. \quad (2.64)$$

Entonces, la ecuación de Dyson en esta forma de submatrices es

$$(z\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{G}(z) = \begin{pmatrix} z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_1 & -\mathbf{a}_{1,2} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{a}_{2,1} & z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2 & -\mathbf{a}_{2,3} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{a}_{3,2} & z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{g}_{1,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{1,2}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{1,3}^{(2)}(z) \\ \mathbf{g}_{2,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{2,2}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{2,3}^{(2)}(z) \\ \mathbf{g}_{3,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{3,2}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{3,3}^{(2)}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (2.65)$$

Al desarrollar la multiplicación de las matrices en la ecuación (2.65), se obtiene las siguientes 9 ecuaciones matriciales

$$(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_1)\mathbf{g}_{1,l}^{(2)}(z) - \mathbf{a}_{1,2}\mathbf{g}_{2,l}^{(2)}(z) = \delta_{1,l}\mathbf{I}, \quad (2.66)$$

$$(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)\mathbf{g}_{2,l}^{(2)}(z) - \mathbf{a}_{2,1}\mathbf{g}_{1,l}^{(2)}(z) - \mathbf{a}_{2,3}\mathbf{g}_{3,l}^{(2)}(z) = \delta_{2,l}\mathbf{I}, \quad (2.67)$$

$$(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_3)\mathbf{g}_{3,l}^{(2)}(z) - \mathbf{a}_{3,2}\mathbf{g}_{2,l}^{(2)}(z) = \delta_{3,l}\mathbf{I}, \quad (2.68)$$

donde $l=1, 2$ ó 3 y $\delta_{i,j}$ es la delta de Kronecker. Al sustituir la ecuación (2.67) en las ecuaciones (2.66) y (2.68) se obtienen

$$[z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_1 - \mathbf{a}_{1,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\mathbf{a}_{2,1}]\mathbf{g}_{1,l}^{(2)}(z) - \mathbf{a}_{1,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\mathbf{a}_{2,3}\mathbf{g}_{3,l}^{(2)}(z) = \delta_{1,l}\mathbf{I} + \mathbf{a}_{1,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\delta_{2,l}\mathbf{I}, \quad (2.69)$$

$$[z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_3 - \mathbf{a}_{3,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\mathbf{a}_{2,3}]\mathbf{g}_{3,l}^{(2)}(z) - \mathbf{a}_{3,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\mathbf{a}_{2,1}\mathbf{g}_{1,l}^{(2)}(z) = \delta_{3,l}\mathbf{I} + \mathbf{a}_{3,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\delta_{2,l}\mathbf{I}, \quad (2.70)$$

donde l puede ser únicamente 1 o 3 y por lo que $\delta_{2,l}=0$. De esta forma, la ecuación (2.65) se puede reescribir como

$$\begin{pmatrix} z\mathbf{I} - \mathbf{E}_L(2) & -\boldsymbol{\alpha}_{1,3}(2) \\ -\boldsymbol{\alpha}_{3,1}(2) & z\mathbf{I} - \mathbf{E}_R(2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{g}_{1,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{1,3}^{(2)}(z) \\ \mathbf{g}_{1,3}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{3,3}^{(2)}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (2.71)$$

donde las submatrices son

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_L(2) &= \boldsymbol{\varepsilon}_1 + \boldsymbol{\alpha}_{1,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\boldsymbol{\alpha}_{2,1}, & \mathbf{E}_R(2) &= \boldsymbol{\varepsilon}_3 + \boldsymbol{\alpha}_{3,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\boldsymbol{\alpha}_{2,3}, \\ \boldsymbol{\alpha}_{1,3}(2) &= \boldsymbol{\alpha}_{1,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\boldsymbol{\alpha}_{2,3} & \text{y} & \boldsymbol{\alpha}_{3,1}(2) = \boldsymbol{\alpha}_{3,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\boldsymbol{\alpha}_{2,1}. \end{aligned} \quad (2.72)$$

En general, este proceso se puede realizar para la generación n en el cual la *DOS* con 2 átomos por celda tiene la expresión siguiente

$$DOS(E, n) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im Tr} [\mathbf{A}(z, n) \mathbf{g}_{LL}^{(n)}(z) + \mathbf{B}(z, n) \mathbf{g}_{RR}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z, n) \mathbf{g}_{LR}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z, n) \mathbf{g}_{RL}^{(n)}(z) + \mathbf{F}(z, n)] \quad (2.73)$$

donde las relaciones de recurrencia son los siguientes

$$\mathbf{A}(z, n) = \mathbf{A}(z, n-1) + \mathbf{D}(z, n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z, n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z, n)]^T \mathbf{C}(z, n-1) + [\boldsymbol{\theta}_1(z, n)]^T \boldsymbol{\Theta}(z, n) \boldsymbol{\theta}_1(z, n), \quad (2.74)$$

$$\mathbf{B}(z, n) = \mathbf{B}(z, n-2) + \mathbf{C}(z, n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z, n) + [\boldsymbol{\theta}_2(z, n)]^T \mathbf{D}(z, n-2) + [\boldsymbol{\theta}_2(z, n)]^T \boldsymbol{\Theta}(z, n) \boldsymbol{\theta}_2(z, n), \quad (2.75)$$

$$\mathbf{C}(z, n) = \mathbf{C}(z, n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z, n) + [\boldsymbol{\theta}_2(z, n)]^T \mathbf{C}(z, n-1) + [\boldsymbol{\theta}_2(z, n)]^T \boldsymbol{\Theta}(z, n) \boldsymbol{\theta}_1(z, n), \quad (2.76)$$

$$\mathbf{D}(z, n) = \mathbf{D}(z, n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z, n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z, n)]^T \mathbf{D}(z, n-2) + [\boldsymbol{\theta}_1(z, n)]^T \boldsymbol{\Theta}(z, n) \boldsymbol{\theta}_2(z, n), \quad (2.77)$$

$$\mathbf{F}(z, n) = \boldsymbol{\Theta}(z, n) \boldsymbol{\theta}_0(z, n) + \mathbf{F}(z, n-1) + \mathbf{F}(z, n-2). \quad (2.78)$$

Éstas ecuaciones y las submatrices de la función de Green se desarrollan a detalle en el apéndice D. Nótese que a partir de las ecuaciones (2.54) y (2.73) se desarrollarán los cálculos para esta tesis.

Cabe mencionar que el método de renormalización no es eficiente para sistemas multidimensionales, ya que todos los sitios de la frontera entre subsistemas deben considerarse explícitamente con el fin de preservar todas las posibles trayectorias de correlación. Así, un sistema de d dimensiones al ser renormalizada se reduce a una de $d-1$ dimensiones, en donde el número de grados de libertad diverge cuando el sistema original diverge, excepto para $d=1$. Una opción para estudiar estos sistemas multidimensionales es aplicar el método de renormalización junto con el teorema de convolución si el hamiltoniano del sistema es separable [Sánchez, 2004].

2.5 Teorema de Convolución

Como se mencionó en la sección anterior, para estudiar sistemas multidimensionales se puede aplicar conjuntamente el método de renormalización con el teorema de convolución si el hamiltoniano del

sistema \mathbf{H} es separable. Por ejemplo, el teorema de convolución para 3 dimensiones es válido si

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_x \otimes \mathbf{I}_y \otimes \mathbf{I}_z + \mathbf{I}_x \otimes \mathbf{H}_y \otimes \mathbf{I}_z + \mathbf{I}_x \otimes \mathbf{I}_y \otimes \mathbf{H}_z, \quad (2.79)$$

donde \otimes es la operación de producto directo de matrices. La ecuación (2.79) indica que el hamiltoniano \mathbf{H} se puede descomponer en los hamiltonianos espaciales \mathbf{H}_i ($i = x, y$ y z) del sistema.

En particular, para el potencial de Born-von Karman, la ecuación de movimiento (2.38) se puede reescribir de la forma siguiente

$$M\omega^2 \begin{pmatrix} u_x(1) \\ u_x(2) \\ u_x(3) \\ u_x(4) \\ u_x(5) \\ u_x(6) \\ u_x(7) \\ u_x(8) \\ u_y(1) \\ u_y(2) \\ u_y(3) \\ u_y(4) \\ u_y(5) \\ u_y(6) \\ u_y(7) \\ u_y(8) \\ u_z(1) \\ u_z(2) \\ u_z(3) \\ u_z(4) \\ u_z(5) \\ u_z(6) \\ u_z(7) \\ u_z(8) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \varepsilon & -\beta & -\alpha & 0 & -\beta & 0 \\ -\beta & \varepsilon & 0 & -\alpha & 0 & -\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\alpha & 0 & \varepsilon & -\beta & 0 & 0 & -\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha & -\beta & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & -\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\beta & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & -\beta & -\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\beta & 0 & 0 & -\beta & \varepsilon & 0 & -\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\beta & 0 & -\alpha & 0 & \varepsilon & -\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\beta & 0 & -\alpha & -\beta & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & -\alpha & -\beta & 0 & -\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\alpha & \varepsilon & 0 & -\beta & 0 & -\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\beta & 0 & \varepsilon & -\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\beta & -\alpha & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & -\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & -\beta & -\beta & 0 & -\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\beta & \varepsilon & 0 & -\beta & 0 & -\alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\beta & 0 & \varepsilon & -\beta & 0 & 0 & -\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\beta & -\beta & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & -\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\alpha & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & -\beta & -\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\alpha & 0 & 0 & -\beta & \varepsilon & 0 & -\beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\alpha & 0 & -\beta & 0 & \varepsilon & -\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\alpha & 0 & -\beta & -\beta & \varepsilon & -\beta & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_x(1) \\ u_x(2) \\ u_x(3) \\ u_x(4) \\ u_x(5) \\ u_x(6) \\ u_x(7) \\ u_x(8) \\ u_y(1) \\ u_y(2) \\ u_y(3) \\ u_y(4) \\ u_y(5) \\ u_y(6) \\ u_y(7) \\ u_y(8) \\ u_z(1) \\ u_z(2) \\ u_z(3) \\ u_z(4) \\ u_z(5) \\ u_z(6) \\ u_z(7) \\ u_z(8) \end{pmatrix} = 0. \quad (2.80)$$

Nótese que la ecuación (2.80) para ondas propagándose en la dirección x puede reescribirse como

$$M\omega^2 \bar{\mathbf{u}} - \begin{pmatrix} \Phi_L & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Phi_{Ty} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \Phi_{Tz} \end{pmatrix} \bar{\mathbf{u}} = \mathbf{0}, \quad (2.81)$$

donde $\bar{\mathbf{u}}^T = (\bar{\mathbf{u}}_x, \bar{\mathbf{u}}_y, \bar{\mathbf{u}}_z)^T$ con $\bar{\mathbf{u}}_\mu = (u_\mu(1), u_\mu(2), u_\mu(3), u_\mu(4), u_\mu(5), u_\mu(6), u_\mu(7), u_\mu(8))$ siendo $\mu = x, y$ o z . El superíndice T indica la transpuesta de vector y las matrices dinámicas desacopladas del modo longitudinal (L), transversal en y (Ty) y transversal en z (Tz) son

$$\begin{aligned}
\Phi_L &= \begin{pmatrix} \varepsilon & -\beta & -\alpha & 0 & -\beta & 0 & 0 & 0 \\ -\beta & \varepsilon & 0 & -\alpha & 0 & -\beta & 0 & 0 \\ -\alpha & 0 & \varepsilon & -\beta & 0 & 0 & -\beta & 0 \\ 0 & -\alpha & -\beta & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & -\beta \\ -\beta & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & -\beta & -\alpha & 0 \\ 0 & -\beta & 0 & 0 & -\beta & \varepsilon & 0 & -\alpha \\ 0 & 0 & -\beta & 0 & -\alpha & 0 & \varepsilon & -\beta \\ 0 & 0 & 0 & -\beta & 0 & -\alpha & -\beta & \varepsilon \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \beta & -\beta \\ -\beta & \beta \end{pmatrix} \otimes \mathbf{I}^y \otimes \mathbf{I}^z + \mathbf{I}^x \otimes \begin{pmatrix} \alpha & -\alpha \\ -\alpha & \alpha \end{pmatrix} \otimes \mathbf{I}^z + \mathbf{I}^x \otimes \mathbf{I}^y \otimes \begin{pmatrix} \beta & -\beta \\ -\beta & \beta \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{2.82}$$

$$\begin{aligned}
\Phi_{Ty} &= \begin{pmatrix} \varepsilon & -\alpha & -\beta & 0 & -\beta & 0 & 0 & 0 \\ -\alpha & \varepsilon & 0 & -\beta & 0 & -\beta & 0 & 0 \\ -\beta & 0 & \varepsilon & -\alpha & 0 & 0 & -\beta & 0 \\ 0 & -\beta & -\alpha & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & -\beta \\ -\beta & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & -\alpha & -\beta & 0 \\ 0 & -\beta & 0 & 0 & -\alpha & \varepsilon & 0 & -\beta \\ 0 & 0 & -\beta & 0 & -\beta & 0 & \varepsilon & -\alpha \\ 0 & 0 & 0 & -\beta & 0 & -\beta & -\alpha & \varepsilon \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \beta & -\beta \\ -\beta & \beta \end{pmatrix} \otimes \mathbf{I}^y \otimes \mathbf{I}^z + \mathbf{I}^x \otimes \begin{pmatrix} \beta & -\beta \\ -\beta & \beta \end{pmatrix} \otimes \mathbf{I}^z + \mathbf{I}^x \otimes \mathbf{I}^y \otimes \begin{pmatrix} \alpha & -\alpha \\ -\alpha & \alpha \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.83}$$

y

$$\begin{aligned}
\Phi_{Tz} &= \begin{pmatrix} \varepsilon & -\beta & -\beta & 0 & -\alpha & 0 & 0 & 0 \\ -\beta & \varepsilon & 0 & -\beta & 0 & -\alpha & 0 & 0 \\ -\beta & 0 & \varepsilon & -\beta & 0 & 0 & -\alpha & 0 \\ 0 & -\beta & -\beta & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & -\alpha \\ -\alpha & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & -\beta & -\beta & 0 \\ 0 & -\alpha & 0 & 0 & -\beta & \varepsilon & 0 & -\beta \\ 0 & 0 & -\alpha & 0 & -\beta & 0 & \varepsilon & -\beta \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha & 0 & -\beta & -\beta & \varepsilon \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \alpha & -\alpha \\ -\alpha & \alpha \end{pmatrix} \otimes \mathbf{I}^y \otimes \mathbf{I}^z + \mathbf{I}^x \otimes \begin{pmatrix} \beta & -\beta \\ -\beta & \beta \end{pmatrix} \otimes \mathbf{I}^z + \mathbf{I}^x \otimes \mathbf{I}^y \otimes \begin{pmatrix} \beta & -\beta \\ -\beta & \beta \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.84}$$

Por lo tanto, la matriz dinámica (2.80) es separable con lo cual se pueden estudiar los modos vibracionales a partir del análisis de las submatrices dinámicas.

Para ejemplificar el uso del teorema de la convolución, calcularemos la *DOS* fonónica para una doble cadena en forma de

escalera con interacción a primeros vecinos como se muestra en la Figura 2.7.

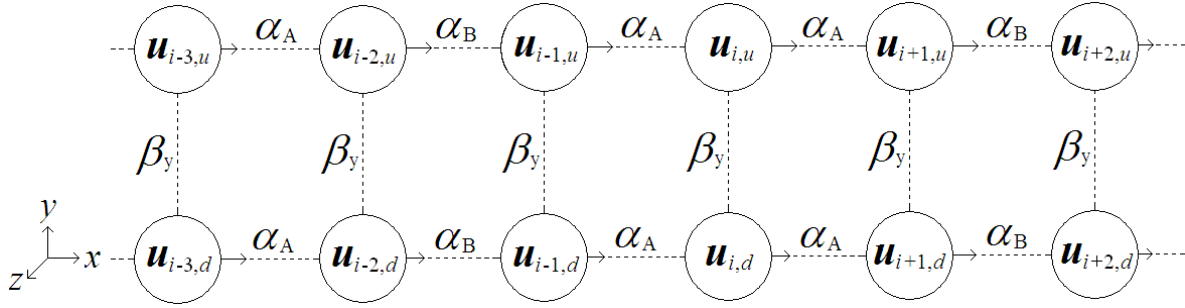


Figura 2.7 Modo longitudinal fonónico en una doble cadena en forma de escalera con interacción entre vecinos más cercanos con parámetros de fuerza central α y no central β , cuya amplitud se indica dentro de los círculos.

La matriz dinámica derivada del potencial de Born-von Karman es separable, esto es

$$\Phi = \Phi_x \otimes \mathbf{I}_y + \mathbf{I}_x \otimes \Phi_y. \quad (2.85)$$

La ecuación de movimiento correspondiente tiene la forma

$$m\omega^2 \mathbf{u} = \Phi \mathbf{u} = (\Phi_x \otimes \mathbf{I}_y + \mathbf{I}_x \otimes \Phi_y) \begin{pmatrix} \mathbf{u}_x \\ \mathbf{u}_y \end{pmatrix} = (m\omega_\alpha^2 \mathbf{I}_x \otimes \mathbf{I}_y + \mathbf{I}_x \otimes m\omega_\beta^2 \mathbf{I}_y) \begin{pmatrix} \mathbf{u}_x \\ \mathbf{u}_y \end{pmatrix}, \quad (2.86)$$

donde $\Phi_x \mathbf{u}_x = m\omega_\alpha^2 \mathbf{u}_x$ y $\Phi_y \mathbf{u}_y = m\omega_\beta^2 \mathbf{u}_y$. De la ecuación (2.86) se tiene

$$\omega^2 = \omega_\alpha^2 + \omega_\beta^2. \quad (2.87)$$

La función de Green asociada a la matriz dinámica (2.85) es

$$G_{s,s'}(l,l',z) = \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle l|\alpha\rangle \langle \alpha|l'\rangle \langle s|\beta\rangle \langle \beta|s'\rangle}{z - (m\omega_\alpha^2 + m\omega_\beta^2)} \quad (2.88)$$

donde $z = m\omega^2 + i\eta$, l y l' son índices de celda, mientras que s y s' indican posición atómica dentro de la celda. Usando la propiedad siguiente de la delta de Dirac,

$$f(\zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} d\chi f(\chi) \delta(\zeta - \chi), \quad (2.89)$$

la ecuación (2.88) se reescribe como

$$\begin{aligned} G_{s,s'}(l,l',z) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle l|\alpha\rangle \langle \alpha|l'\rangle \langle s|\beta\rangle \langle \beta|s'\rangle}{z - (m\omega_\alpha^2 + \zeta)} \delta(\zeta - m\omega_\beta^2) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \sum_{\alpha} \frac{\langle l|\alpha\rangle \langle \alpha|l'\rangle}{z - (m\omega_\alpha^2 + \zeta)} \sum_{\beta} \langle s|\beta\rangle \langle \beta|s'\rangle \delta(\zeta - m\omega_\beta^2). \end{aligned} \quad (2.90)$$

De la ecuación (A.9) se tiene

$$-\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} G_{s,s'}^\perp(z) = \sum_{\beta} \langle s|\beta\rangle \langle \beta|s'\rangle \delta(m\omega^2 - m\omega_{\beta}^2), \quad (2.91)$$

donde $(m\omega_{\beta}^2 \mathbf{I} - \Phi_y) \mathbf{G}^\perp = \mathbf{I}$. Entonces la ecuación (2.90) se reescribe como

$$\begin{aligned} G_{s,s'}(l,l',z) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \sum_{\alpha} \frac{\langle l|\alpha\rangle \langle \alpha|l'\rangle}{z - (m\omega_{\alpha}^2 + \zeta)} \left[-\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0^+} \text{Im} G_{s,s'}^\perp(\zeta + i\eta') \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta G^\parallel(l,l',z - \zeta) \left[-\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0^+} \text{Im} G_{s,s'}^\perp(\zeta + i\eta') \right], \end{aligned} \quad (2.92)$$

además $(m\omega_{\alpha}^2 \mathbf{I} - \Phi_x) \mathbf{G}^\parallel = \mathbf{I}$. En particular, la *DOS* total se calcula por

$$\begin{aligned} DOS(m\omega^2) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \sum_{s,l} G_{s,s}(l,l,z) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \left[-\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \sum_l G^\parallel(l,l,z - \zeta) \right] \left[-\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0^+} \text{Im} \sum_s G_{s,s}^\perp(\zeta + i\eta') \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta DOS^\parallel(m\omega^2 - \zeta) DOS^\perp(\zeta), \end{aligned} \quad (2.93)$$

siendo

$$DOS^\parallel(m\omega^2) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \sum_l G^\parallel(l,l,z), \quad (2.94)$$

$$DOS^\perp(\zeta) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0^+} \text{Im} \sum_s G_{s,s}^\perp(\zeta + i\eta'). \quad (2.95)$$

Usando la definición de la *DOS* (A.10), la ecuación (2.93) puede reescribirse como

$$DOS(m\omega^2) = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta DOS^\parallel(m\omega^2 - \zeta) \sum_{\beta} \delta(\zeta - m\omega_{\beta}^2) = \sum_{\beta} DOS^\parallel(m\omega^2 - m\omega_{\beta}^2). \quad (2.96)$$

Las ecuaciones (2.93) y (2.96) se utilizarán para el cálculo de la *DOS* fonónica de una doble cadena de Fibonacci y los resultados de dicho cálculo se presentan en el capítulo 3.

Capítulo 3 Doble Cadena Cuasiperiódica

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en un sistema de dos cadenas en forma de escalera como se muestra en la Figura 2.7 para las excitaciones fonónicas dentro del modelo de Born-von Karman y la Figura 3.1 para los electrones partiendo del modelo de amarre fuerte. Cabe mencionar que este tipo de doble cadena sirve para analizar propiedades del ácido desoxirribonucleico (ADN) [Maciá, 2005]. En general, los modos vibracionales constan de uno longitudinal (LM) y de dos transversales (TM), en contraste con el problema escalar para el caso electrónico.

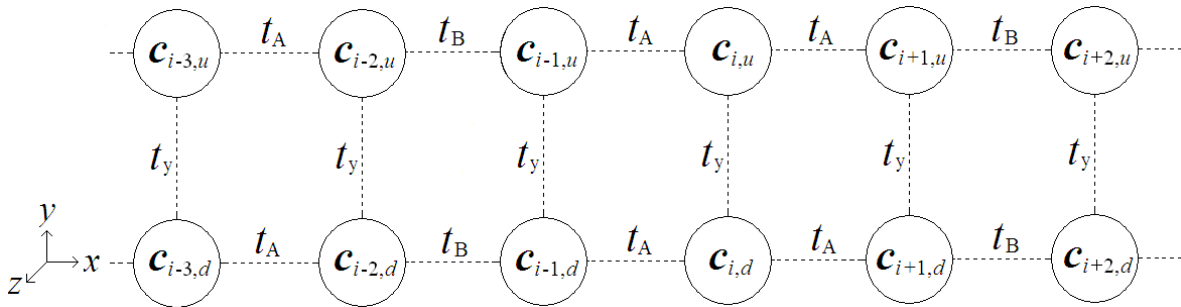


Figura 3.1 Sistema de dos cadenas de Fibonacci en forma de escalera para el problema electrónico de una sola banda con autoenergías iguales a cero y las amplitudes de la función de onda se muestran en los círculos.

Las dobles cadenas mostradas en las Figuras 2.7 y 3.1 son formadas por cadenas cuyo ordenamiento de enlaces sigue la secuencia de Fibonacci. Para el caso fonónico en el modo longitudinal, los enlaces pueden ser caracterizados por el parámetro de fuerza central α_A o por α_B , mientras los enlaces que unen las dos cadenas son descritos por el parámetro de fuerza no central β_y , como se muestra en la Figura 2.7. Por otro lado, para los electrones los enlaces son representados por las integrales de salto t_A o t_B , mientras que las dos cadenas se unen por los enlaces caracterizados a través de la integral de salto t_y , como se ilustra en la Figura 3.1.

3.1 Densidad de Estados

A continuación se aplica el método de renormalización para la densidad de estados (*DOS*), desarrollado en los apéndices C y D, al sistema de doble cadena de Fibonacci para la generación $n=39$ de 102334156 átomos por cadena debido a que de esta forma se puede estudiar un sólido macroscópico constituido por 10^{23} átomos. Para las excitaciones

fonónicas se analizan los tres modos vibracionales y para el caso electrónico se tiene un solo problema escalar. En general, los espectros de DOS presentados están normalizados por el número total de átomos.

1.- Caso periódico. En la Figura 3.2 se muestran DOS obtenida mediante las ecuaciones del apéndice D para los fonones (líneas rojas) modo longitudinal (LM) con enlaces en las cadenas caracterizados por α y los enlaces entre éstas descritos por β_y igual a (a) 0, (b) 0.25α , (c) 0.5α , (d) 0.75α y (e) α . La parte imaginaria de estos cálculos fue $\eta = 10^{-3}\alpha$. Análogamente, para la DOS de los electrones (líneas azules) se tienen una sola integral de salto t en las dos cadenas periódicas y t_y para los enlaces que une a éstas igual a (a') 0, (b') $0.25t$, (c') $0.5t$, (d') $0.75t$ y (e') t . La parte imaginaria de la energía para estas DOS fue $10^{-3}|t|$.

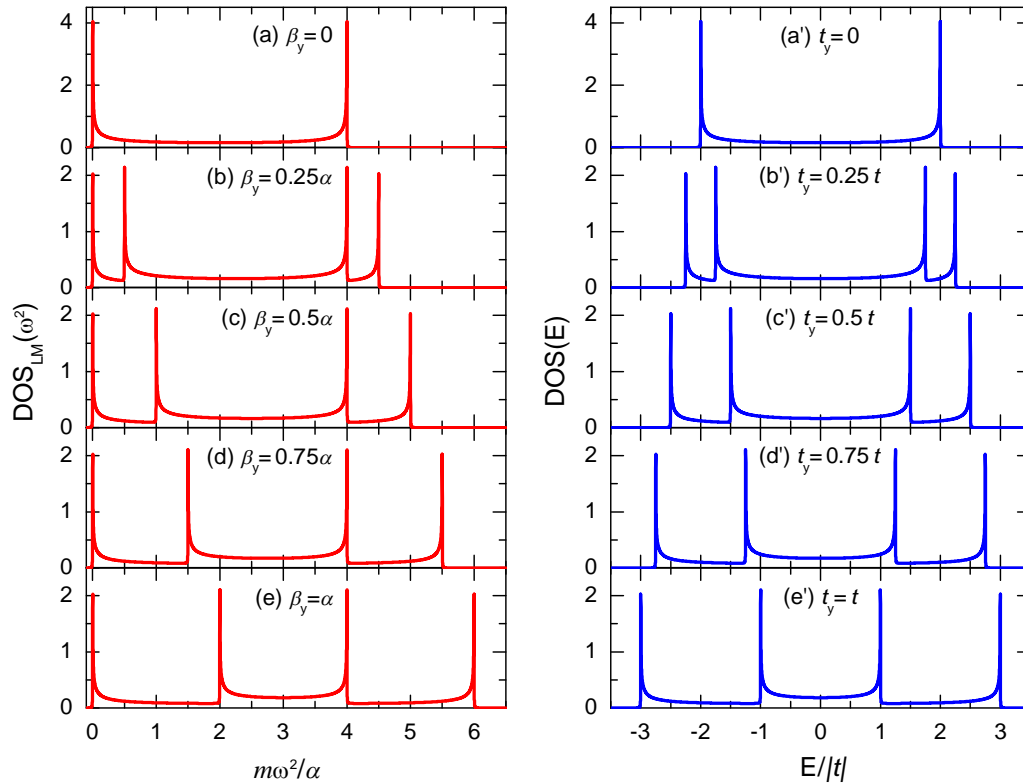


Figura 3.2 Densidad de estados (DOS) fonónica (líneas rojas) de una doble cadena periódica con β_y igual a (a) 0, (b) 0.25α , (c) 0.5α , (d) 0.75α , (e) α y DOS electrónica (líneas azules) del mismo sistema con t_y igual a (a') 0, (b') $0.25t$, (c') $0.5t$, (d') $0.75t$ y (e') t , siendo respectivamente α y t los parámetros de fuerza central e integral de salto en las cadenas periódicas.

De la Figura 3.2, se observa que la DOS fonónica es la misma que la electrónica, exceptuando una traslación en la energía. Esta traslación se origina de la autoenergía diferente de cero para el caso fonónico y en consecuencia la frecuencia toma únicamente valores positivos.

Cada una de las DOS 3.2(a) y 3.2(a') puede visualizarse como suma de dos densidades de estados correspondientes a cadenas periódicas unidimensionales. De la misma forma, las DOS (b), (b'), (c), (c'), (d), (d'), (e) y (e') de la Figura 3.2 pueden imaginarse como la superposición de dos densidades de estados trasladadas una con respecto a otra. La magnitud de dicha traslación es $m\omega_\beta^2 = 0$ ó 2β para los fonones y $E_\beta = -t$ ó t para los electrones, como se establece en la ecuación (2.96).

Cabe mencionar que la integral de DOS con respecto a la energía es siempre unitaria y la altura de las singularidades de van Hove -donde la velocidad de grupo es igual a cero o la DOS diverge- depende del valor de la parte imaginaria utilizada en el cálculo.

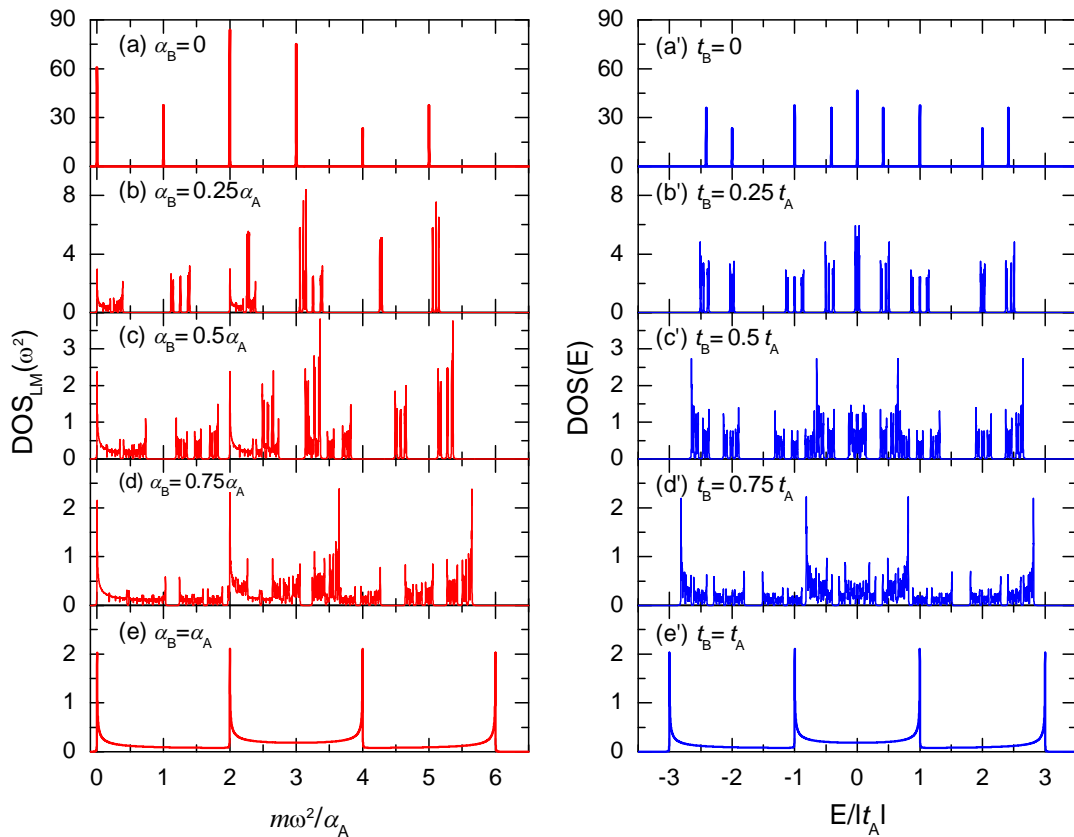


Figura 3.3 Densidad de estados (DOS) fonónica (líneas rojas) de una doble cadena cuasiperiódica con $\beta_y = \alpha_A$ y α_B igual a (a) 0, (b) $0.25\alpha_A$, (c) $0.5\alpha_A$, (d) $0.75\alpha_A$, (e) α_A y DOS electrónica (líneas azules) del mismo sistema con $t_y = t_A$ y t_B igual a (a') 0, (b') $0.25t_A$, (c') $0.5t_A$, (d') $0.75t_A$ y (e') t_A .

2.- Caso cuasiperiódico LM. En la Figura 3.3 se muestran DOS de una doble cadena de Fibonacci para los fonones LM (líneas rojas) con α_B igual a (a) 0, (b) $0.25\alpha_A$, (c) $0.5\alpha_A$, (d) $0.75\alpha_A$ y (e) α_A , mientras que los

enlaces entre las cadenas cuasiperiódicas son descritos por $\beta_y = \alpha_A$. La parte imaginaria de estos cálculos fue $\eta = 10^{-3} \alpha_A$. Análogamente, para el caso de los electrones (líneas azules) se tienen integrales de salto t_B igual a (a') 0, (b') $0.25 t_A$, (c') $0.5 t_A$, (d') $0.75 t_A$ y (e') t_A en las dos cadenas cuasiperiódicas y los enlaces que unen a éstas es $t_y = t_A$. La parte imaginaria de la energía fue $10^{-3} |t_A|$.

Para el caso de $\alpha_B = t_B = 0$, $\beta_y = \alpha_A$ y $t_y = t_A$ -ver las Figuras 3.3(a) y 3.3(a')- la ubicación de los picos se puede determinar en forma analítica, debido a que el sistema se descompone en moléculas tipo A de 4 átomos y de tipo AA de 6 átomos como se muestran en las Figuras 3.4(a) y 3.4(b) respectivamente.

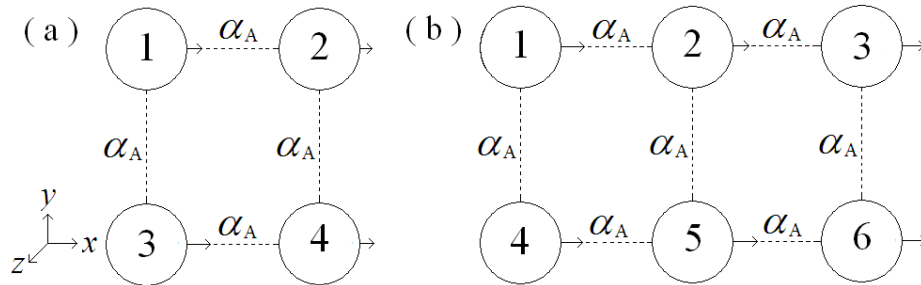


Figura 3.4 Representación esquemática de las moléculas con (a) 4 átomos y (b) 6 átomos con interacciones α_A entre los vecinos más cercanos. La enumeración de los átomos se encuentra dentro de los círculos.

La matriz dinámica para la molécula tipo A es

$$\Phi = \begin{pmatrix} 2\alpha_A & \alpha_A & \alpha_A & 0 \\ \alpha_A & 2\alpha_A & 0 & \alpha_A \\ \alpha_A & 0 & 2\alpha_A & \alpha_A \\ 0 & \alpha_A & \alpha_A & 2\alpha_A \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

mientras que la de la molécula tipo AA de 6 átomos es

$$\Phi = \begin{pmatrix} 2\alpha_A & \alpha_A & 0 & \alpha_A & 0 & 0 \\ \alpha_A & 3\alpha_A & \alpha_A & 0 & \alpha_A & 0 \\ 0 & \alpha_A & 2\alpha_A & 0 & 0 & \alpha_A \\ \alpha_A & 0 & 0 & 2\alpha_A & \alpha_A & 0 \\ 0 & \alpha_A & 0 & \alpha_A & 3\alpha_A & \alpha_A \\ 0 & 0 & \alpha_A & 0 & \alpha_A & 2\alpha_A \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Usando $\Phi\mathbf{u} = m\omega^2\mathbf{u}$, se encuentran las eigen-frecuencias de vibración correspondientes a la matriz (3.1) $m\omega^2 = 0, 2\alpha_A, 2\alpha_A$ y $4\alpha_A$ y las eigen-frecuencias de la matriz (3.2) serían $m\omega^2 = 0, \alpha_A, 2\alpha_A, 3\alpha_A, 3\alpha_A$ y $5\alpha_A$. Asimismo, para el caso electrónico, los hamiltonianos correspondientes a las dos posibles moléculas son

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0 & t_A & t_A & 0 \\ t_A & 0 & 0 & t_A \\ t_A & 0 & 0 & t_A \\ 0 & t_A & t_A & 0 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

y

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0 & t_A & t_A & 0 & 0 & 0 \\ t_A & 0 & 0 & t_A & 0 & 0 \\ t_A & 0 & 0 & t_A & t_A & 0 \\ 0 & t_A & t_A & 0 & 0 & t_A \\ 0 & 0 & t_A & 0 & 0 & t_A \\ 0 & 0 & 0 & t_A & t_A & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

A partir de la ecuación de Schrödinger estacionaria, $\mathbf{H}\Psi = E\Psi$, se obtienen las eigen-energías del hamiltoniano (3.3) $E = -2t_A, 0, 0$ y $2t_A$ mientras que las eigen-energías correspondientes al hamiltoniano (3.4) son $E = -(\sqrt{2} + 1)t_A, -t_A, -(\sqrt{2} - 1)t_A, (\sqrt{2} - 1)t_A, t_A$ y $(\sqrt{2} + 1)t_A$. De esta forma, se determina la posición de los picos en las Figuras 3.3(a) y 3.3(a'). Para calcular la altura de estos picos se tiene que cuantificar la probabilidad de ocurrencia de las moléculas tipo A y tipo AA como se muestra a continuación.

Sean x el número de las moléculas tipo A y y el de tipo AA en una cadena de Fibonacci de generación n mostrada en la Tabla 1.2, entonces se tiene que

$$x + y - [1 - (-1)^n]/2 = N_B = N_F(n - 2), \quad (3.5)$$

$$x + 2y = N_A = N_F(n - 1), \quad (3.6)$$

donde $N_F(n)$ es el número de átomos en una cadena de Fibonacci de generación n , N_A y N_B son respectivamente los números totales de A y B en la misma cadena. Resolviendo las ecuaciones (3.5) y (3.6) se obtienen

$$x = N_F(n-4) + 1 + (-1)^n, \quad (3.7)$$

$$y = N_F(n-3) - [1 - (-1)^n]/2. \quad (3.8)$$

Entonces, las probabilidades de ocurrencia de las moléculas tipo A de 4 átomos [$P_A(n)$] y tipo AA de 6 átomos [$P_{AA}(n)$] en una cadena de Fibonacci generación n son respectivamente

$$P_A(n) = \frac{x}{N_F(n)} = \frac{N_F(n-4) + 1 + (-1)^n}{N_F(n)}, \quad (3.9)$$

$$P_{AA}(n) = \frac{y}{N_F(n)} = \frac{N_F(n-3) - [1 - (-1)^n]/2}{N_F(n)}. \quad (3.10)$$

Cuando $n \rightarrow \infty$ estas probabilidades son respectivamente

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_A(n) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{N_F(n-4)}{N_F(n)} = \frac{1}{\tau^4}, \quad (3.11)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_{AA}(n) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{N_F(n-3)}{N_F(n)} = \frac{1}{\tau^3} \quad (3.12)$$

donde $\tau = (\sqrt{5} + 1)/2 \approx 1.618034$ es la razón dorada. Por lo tanto, la probabilidad de ocurrencia de la molécula tipo AA es τ veces mayor que la de la molécula tipo A. En consecuencia, por ejemplo, en la Figura 3.3(a) el pico en $m\omega^2 = 5\alpha_A$ tiene una altura τ veces mayor que la del pico localizado en $m\omega^2 = 4\alpha_A$, mientras que en la Figura 3.3(a') el pico en $E = t_A$ es τ veces más alta que el pico en $E = 2t_A$. Por otro lado, el análisis presentado anteriormente indica que los picos en $E = -(\sqrt{2} + 1)t_A, -t_A, -(\sqrt{2} - 1)t_A, (\sqrt{2} - 1)t_A, t_A$ y $(\sqrt{2} + 1)t_A$ debe de tener la misma altura, sin embargo, los picos en $E = -t_A$ y t_A tienen una altura ligeramente mayor que los otros. El origen de esta diferencia de altura podría deberse al número finito de partición de 14000 en la energía usado para nuestro cálculo numérico de *DOS*.

En la Figura 3.5 se muestran *DOS* con los mismos parámetros de la Figura 3.3, excepto por $\beta_y = \alpha_A/2$, mientras que para los electrones se tiene $t_y = t_A/2$. En particular, para las Figuras 3.5(a) y 3.5(a') se puede realizar un análisis equivalente a las Figuras 3.3(a) y 3.3(a') excepto que las nuevas eigen-frecuencias para la molécula tipo A de 4 átomos son $m\omega^2 = 0, \alpha_A, 2\alpha_A$ y $3\alpha_A$ y para la molécula tipo AA de 6 átomos son $m\omega^2 = 0, \alpha_A, \alpha_A, 2\alpha_A, 3\alpha_A$ y $4\alpha_A$. Mientras que en el caso electrónico, las

eigen-energías para la molécula tipo A son $E = -1.5t_A, -0.5t_A, 0.5t_A$ y $1.5t_A$ y $E = -(\sqrt{2} + 0.5)t_A, -(\sqrt{2} - 0.5)t_A, -0.5t_A, 0.5t_A, (\sqrt{2} - 0.5)t_A$ y $(\sqrt{2} + 0.5)t_A$ para la molécula tipo AA.

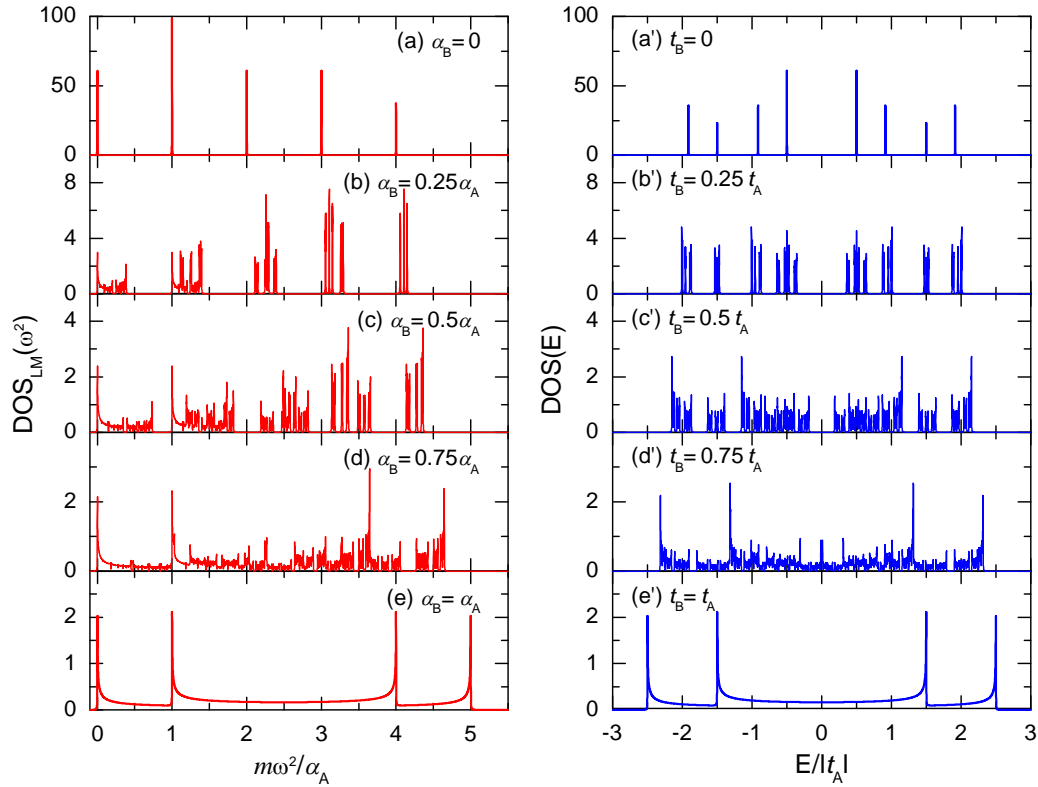


Figura 3.5 Densidad de estados (DOS) fonónica (líneas rojas) de una doble cadena cuasiperiódica con $\beta_y = \alpha_A/2$ y α_B igual a (a) 0, (b) $0.25\alpha_A$, (c) $0.5\alpha_A$, (d) $0.75\alpha_A$, (e) α_A y DOS electrónica (líneas azules) del mismo sistema con $t_y = t_A/2$ y t_B igual a (a') 0, (b') $0.25t_A$, (c') $0.5t_A$, (d') $0.75t_A$ y (e') t_A .

3.- Caso cuasiperiódico TM. La Figura 3.6 muestra los modos transversales (TM) de una doble cadena de Fibonacci, cuyos enlaces horizontales son caracterizados por β_A y β_B igual a 0 en (a) y (a'), $0.25\beta_A$ en (b) y (b'), $0.5\beta_A$ en (c) y (c'), $0.75\beta_A$ en (d) y (d'), β_A en (e) y (e'). Existen dos tipos de modos transversales, ellos son en la dirección y (TMY) donde las cadenas se unen por $\alpha_y = 2\beta_A$, o en la dirección z (TMZ) en el cual éstas se unen por $\beta_y = \beta_A$. La parte imaginaria de la energía es $10^{-3}\beta_A$. En particular, el espectro 3.6(a) tiene las eigen-frecuencias en $m\omega^2 = 0, 2\alpha_A, 4\alpha_A$ y $6\alpha_A$ y en $m\omega^2 = 0, \alpha_A, 3\alpha_A, 4\alpha_A, 5\alpha_A$ y $7\alpha_A$, mientras que en el espectro 3.6(a') las eigen-frecuencias se encuentran en $m\omega^2 = 0, 2\alpha_A, 2\alpha_A$ y $4\alpha_A$ y $m\omega^2 = 0, \alpha_A, 2\alpha_A, 3\alpha_A, 3\alpha_A$ y $5\alpha_A$.

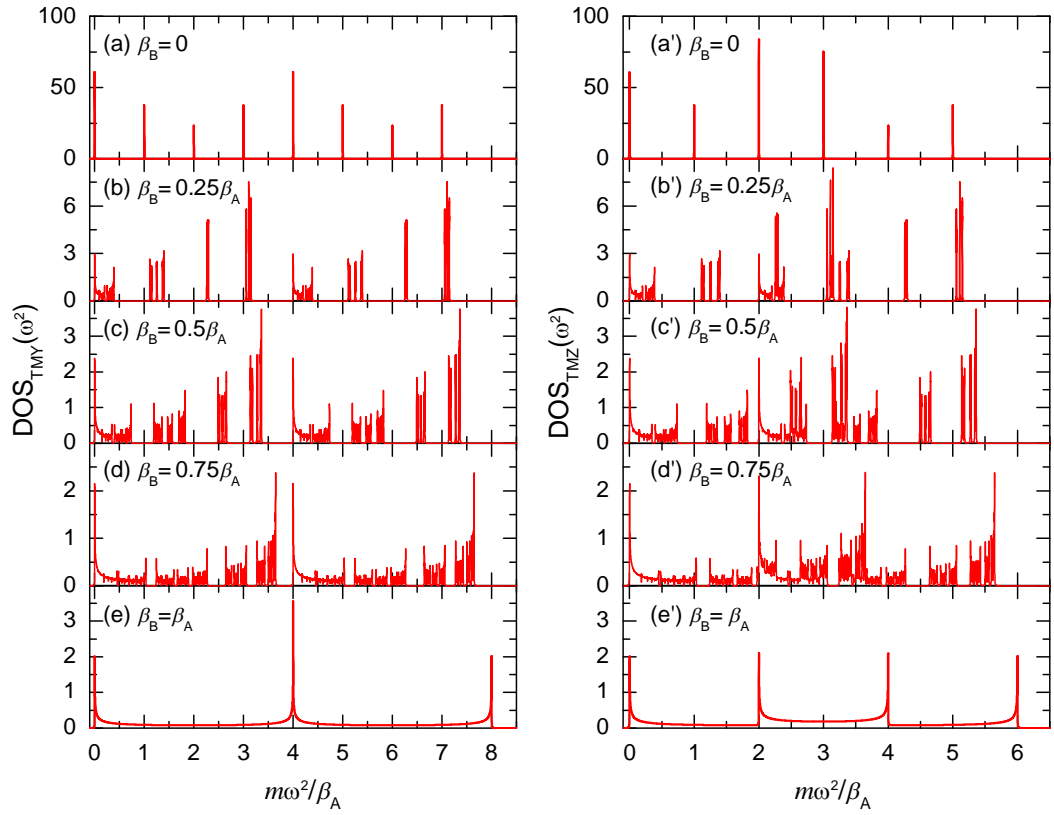


Figura 3.6 Densidad de estados (DOS) fonónica de una doble cadena cuasiperiódica con $\alpha_y = 2\beta_A$ y β_B igual a (a) 0, (b) $0.25\beta_A$, (c) $0.5\beta_A$, (d) $0.75\beta_A$ y (e) β_A para el modo transversal en la dirección y (TMY); $\beta_y = \beta_A$ y β_B igual a (a') 0, (b') $0.25\beta_A$, (c') $0.5\beta_A$, (d') $0.75\beta_A$ y (e') β_A para el modo transversal en la dirección z (TMZ).

A continuación, se presentan el caso mixto cuando la cadena superior es periódica y la inferior es cuasiperiódica tipo Fibonacci, como se muestra en la Figura 3.7.

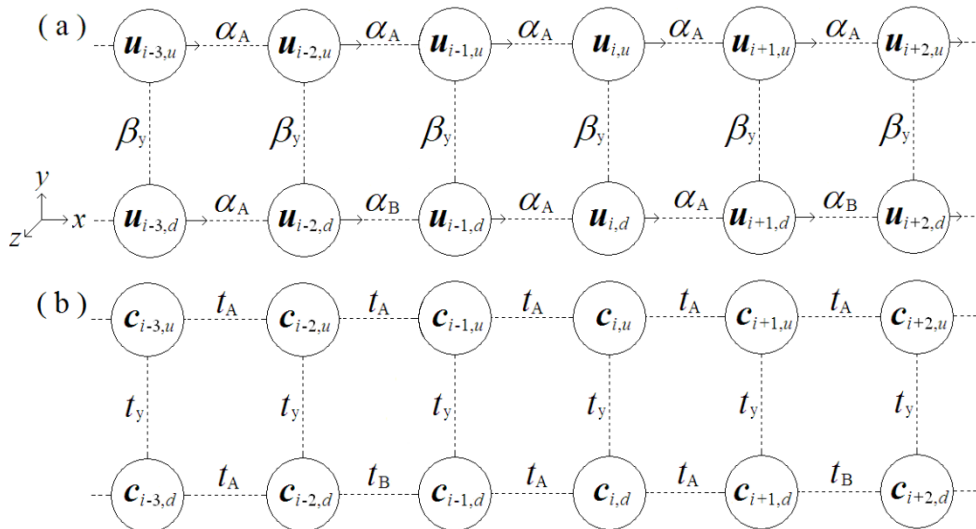


Figura 3.7 Doble cadena mixta -superior periódica e inferior tipo Fibonacci- con amplitudes de la función de onda mostrada en los círculos, (a) para el modo longitudinal fonónico y (b) para el problema electrónico con auto-energías iguales a cero.

4.- Caso mixto LM. En la Figura 3.8 se muestran las DOS del modo longitudinal fonónico (líneas rojas) y del electrónico (líneas azules) para una doble cadena mixta, es decir, cadena superior periódica e inferior cuasiperiódica como se muestra en la Figura 3.7. La cadena cuasiperiódica tipo Fibonacci tiene $\beta_y = \alpha_A$ y α_B igual a (a) 0, (b) $0.25\alpha_A$, (c) $0.5\alpha_A$, (d) $0.75\alpha_A$ y (e) α_A para los fonones LM, mientras que $t_y = t_A$ y t_B igual a (a') 0, (b') $0.25t_A$, (c') $0.5t_A$, (d') $0.75t_A$ y (e') t_A para los electrones.

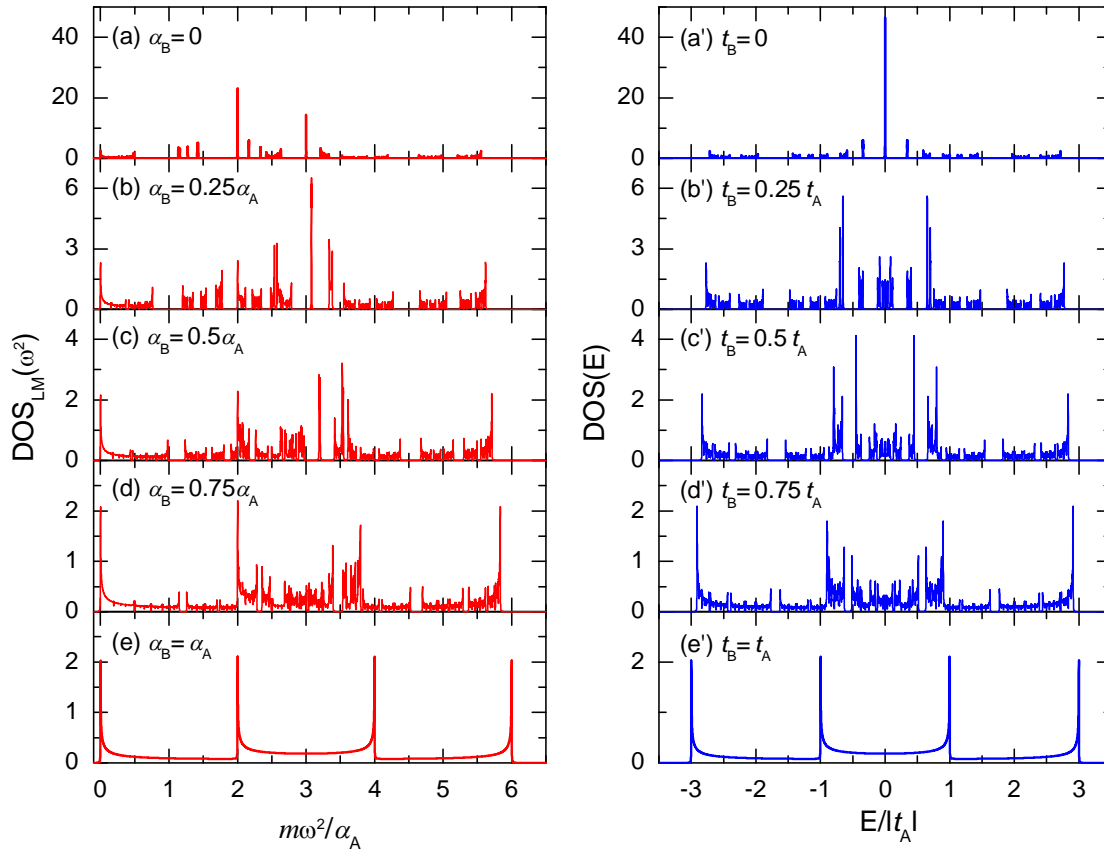


Figura 3.8 Densidad de estados (DOS) de una cadena mixta con $\beta_y = \alpha_A$ y α_B igual a (a) 0, (b) $0.25\alpha_A$, (c) $0.5\alpha_A$, (d) $0.75\alpha_A$, (e) α_A para el modo longitudinal fonónico (líneas rojas) y $t_y = t_A$ y t_B igual a (a') 0, (b') $0.25t_A$, (c') $0.5t_A$, (d') $0.75t_A$ y (e') t_A para el caso electrónico (líneas azules).

5.- Caso mixto TM. En la Figura 3.9 se muestran las DOS para una doble cadena mixta como se ilustra en la Figura 3.7 para los modos transversales en la dirección y (TMY) con $\alpha_y = 2\beta_A$ y en la dirección z (TMZ) con $\beta_y = \beta_A$, ambos tienen β_B igual a 0 en (a) y (a'), $0.25\beta_A$ en (b) y (b'), $0.5\beta_A$ en (c) y (c'), $0.75\beta_A$ en (d) y (d'), β_A en (e) y (e').

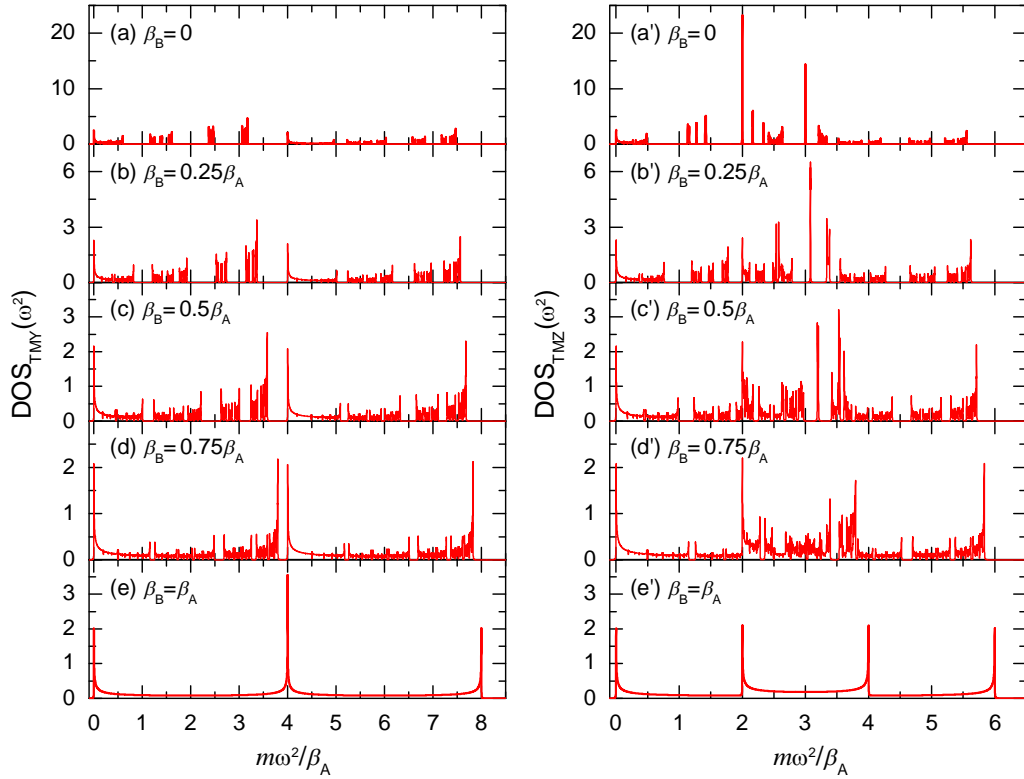


Figura 3.9 Densidad de estados (DOS) fonónica de una doble cadena mixta con $\alpha_y = 2\beta_A$ y β_B igual a (a) 0, (b) $0.25\beta_A$, (c) $0.5\beta_A$, (d) $0.75\beta_A$ y (e) β_A para el modo transversal en la dirección y (TMY); $\beta_y = \beta_A$ y β_B igual a (a') 0, (b') $0.25\beta_A$, (c') $0.5\beta_A$, (d') $0.75\beta_A$ y (e') β_A para el modo transversal en la dirección z (TMZ).

Cabe mencionar que la densidad de estados (DOS) para el caso de doble cadena cuasiperiódica ha sido calculada usando la ecuación (2.96), mientras que para el caso de doble cadena mixta, el teorema de convolución no es aplicable y la DOS se calcula empleando la ecuación (2.73), es decir, la extensión del método de renormalización a cadenas con 2 átomos por celda.

3.2 Localización vía Lyapunov

En la sección 3.1 hemos analizado la estructura de bandas de una doble cadena tanto cuasiperiódica como mixta para el caso electrónico y los modos fonónicos LM, TMY y TMZ. Dicho análisis muestra las energías o frecuencias permitidas y prohibidas para cada caso analizado. Sin embargo, este tipo de análisis no revela la localización de la función de onda, la cual es determinante en el fenómeno de transporte.

En esta sección, estudiaremos la localización de las frecuencias o energías permitidas a través del coeficiente de Lyapunov (γ) usando la ecuación (1.43), donde los elementos de la matriz de transferencia están

dadas por las ecuaciones (B.15) incluyendo dos saturadores periódicos semi-infinitos en cada uno de sus extremos. La inversa del coeficiente de Lyapunov es una de las formas de cuantificar la longitud de localización (ξ) [Heinrichs, 2002], es decir,

$$\xi(\omega^2) \equiv [\gamma(\omega^2)]^{-1} \text{ y } \xi(E) \equiv [\gamma(E)]^{-1}. \quad (3.13)$$

Para el caso de doble cadena, teniendo en cuenta la ortogonalización realizada en la ecuación (B.28), la longitud de localización del sistema se puede definir como

$$\xi_{ph}(\omega^2) \equiv [\xi_{\tilde{u}}(\omega^2) + \xi_{\tilde{d}}(\omega^2)]/2 \text{ y } \xi_{el}(E) \equiv [\xi_{\tilde{u}}(E) + \xi_{\tilde{d}}(E)]/2, \quad (3.14)$$

donde \tilde{u} y \tilde{d} indican las cadenas independientes obtenidas en la ecuación (B.28).

1.- Caso periódico. En la Figura 3.10 se presenta la longitud de localización calculada a partir de la ecuación (3.14) en una doble cadena periódica con β_y igual a (a) 0, (b) 0.25α , (c) 0.5α , (d) 0.75α y (e) α para los modos longitudinales fonónicos, mientras que t_y igual a (a') 0, (b') $0.25t$, (c') $0.5t$, (d') $0.75t$ y (e') t para los electrones.

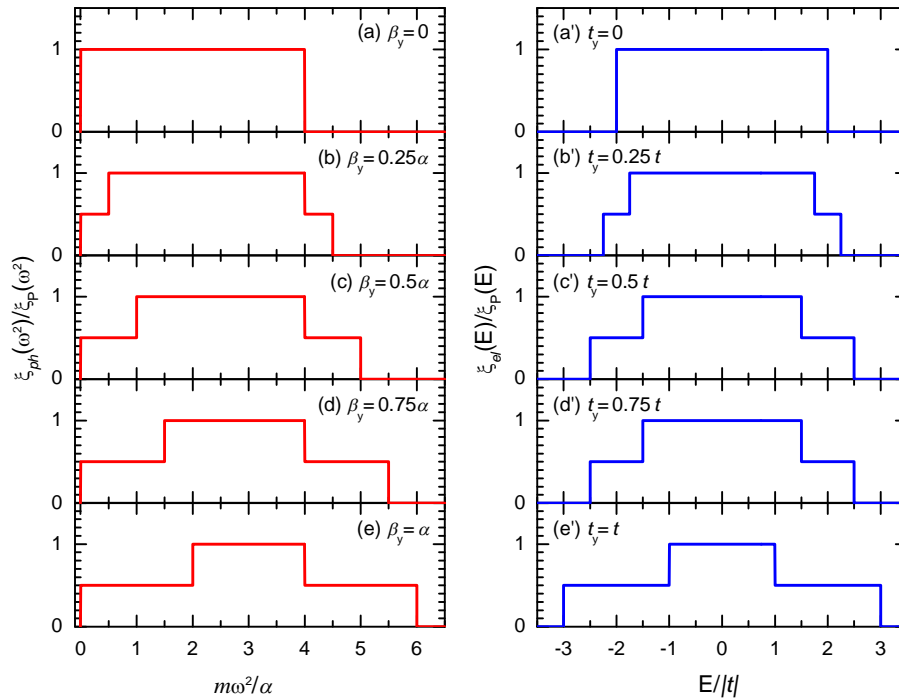


Figura 3.10 Longitud de localización (ξ) obtenida a partir del coeficiente de Lyapunov para una doble cadena periódica con β_y igual a (a) 0, (b) 0.25α , (c) 0.5α , (d) 0.75α y (e) α para los modos longitudinales fonónicos (líneas rojas), mientras que t_y igual a (a') 0, (b') $0.25t$, (c') $0.5t$, (d') $0.75t$ y (e') t para los electrones (líneas azules).

Comparando las longitudes de localización de la Figura 3.10 normalizadas con respecto a $\xi_p(\omega^2)$ -longitud de localización de una cadena periódica simple- con las DOS de la Figura 3.2, observamos que la longitud de localización de los estados es del tamaño de la cadena (estado extendido) y que para cierta zona de frecuencias el valor de $\xi(\omega^2) = 0.5\xi_p(\omega^2)$, debido a que en estas frecuencias una de las dos cadenas no participa en la propagación de onda vibracional.

2.- Caso cuasiperiódico LM. La Figura 3.11 muestra la longitud de localización de una doble cadena de Fibonacci de generación $n=39$ con 102334156 átomos por cadena con $\beta_y = \alpha_A$ y α_B igual a (a) $0.8\alpha_A$, (b) $0.9\alpha_A$ y (c) α_A para los modos longitudinales fonónicos (LM), mientras que $t_y = t_A$ y t_B igual a (a') $0.8t_A$, (b') $0.9t_A$ y (c') t_A para los electrones.

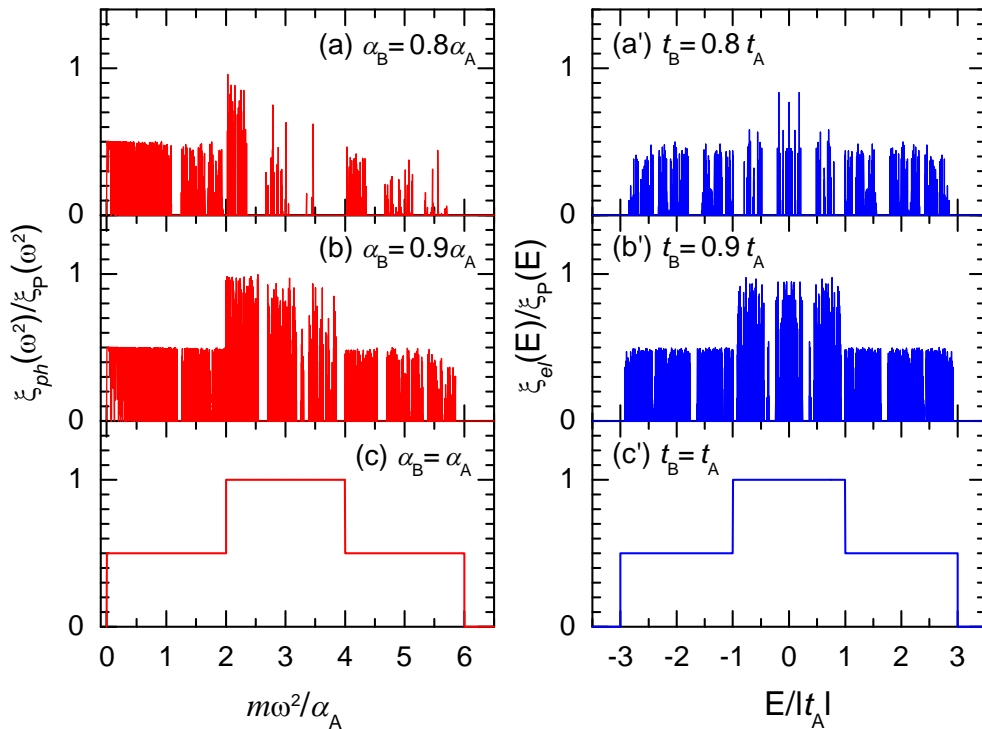


Figura 3.11 Longitud de localización (ξ) para una doble cadena de Fibonacci con $\beta_y = \alpha_A$ y α_B igual a (a) $0.8\alpha_A$, (b) $0.9\alpha_A$ y (c) α_A para los modos longitudinales fonónicos (líneas rojas), mientras que $t_y = t_A$ y t_B igual a (a') $0.8t_A$, (b') $0.9t_A$ y (c') t_A para los electrones (líneas azules).

Nótese que los efectos del desorden cuasiperiódico afectan en menor medida a los fonones acústicos ($\omega \rightarrow 0$) que los ópticos, a diferencia de la simetría observada entre energías positivas y negativas para el caso de electrones.

3.- Caso cuasiperiódico TM. La Figura 3.12 presenta la longitud de localización para los modos vibraciones transversales en la dirección y (TMY) con $\alpha_y = 2\beta_A$ y β_B igual a (a) $0.8\beta_A$, (b) $0.9\beta_A$ y (c) β_A , mientras que $\beta_y = \beta_A$ y β_B igual a (a') $0.8\beta_A$, (b') $0.9\beta_A$ y (c') β_A para los modos transversales en la dirección z (TMZ).

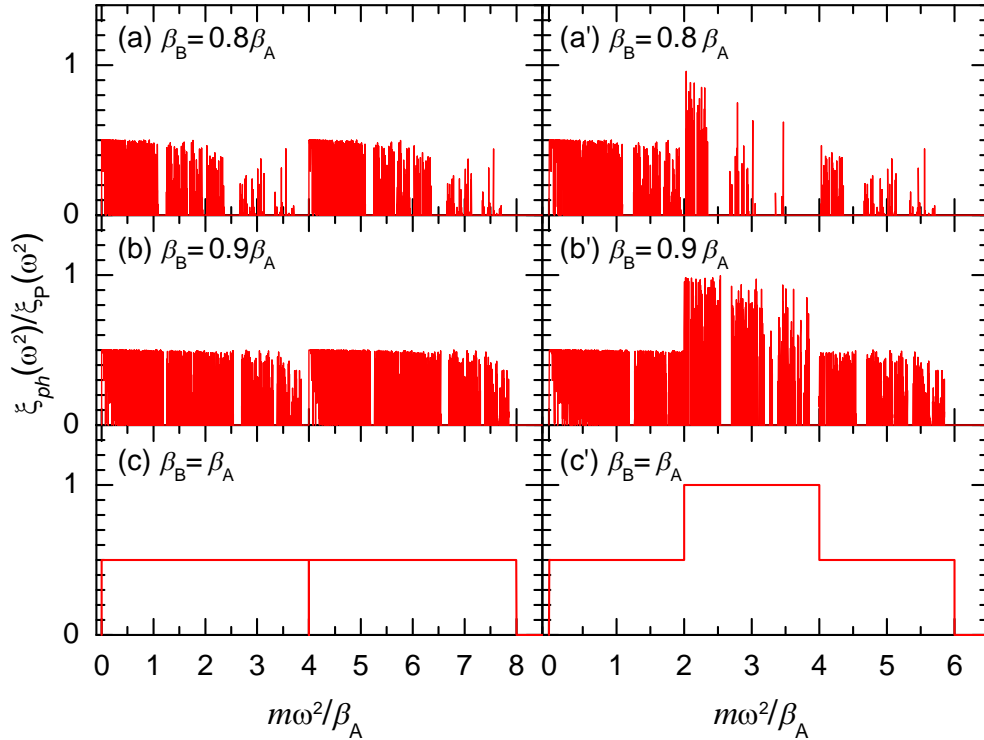


Figura 3.12 Longitud de localización (ξ) de una doble cadena de Fibonacci con $\alpha_y = 2\beta_A$ y β_B igual a (a) $0.8\beta_A$, (b) $0.9\beta_A$ y (c) β_A para los modos transversales en la dirección y (LMY), mientras que $\beta_y = \beta_A$ y β_B igual a (a') $0.8\beta_A$, (b') $0.9\beta_A$ y (c') β_A para los modos transversales en la dirección z (LMZ).

Obsérvese en las Figuras 3.12(a-c) que cada uno de los espectros pueden visualizarse como dos espectros idénticos de una cadena de Fibonacci simple trasladados uno con respecto del otro, debido al valor elegido de interacción entre cadenas de $\alpha_y = 2\beta_A$.

3.3 Conductancias de Landauer

La conductancia térmica por fonones de Landauer (K_{ph}) se define como [Jeong, 2011]

$$K_{ph}(\omega) = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3h} T_{ph}(\omega), \quad (3.15)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, h es la constante de Planck, T es la temperatura y $T_{ph}(\omega) \equiv T_{ph}(\omega^2)$ es la transmitancia fonónica, mientras que la conductancia eléctrica de Landauer (K_{el}) es [Imry, 1999]

$$K_{el}(E) = \frac{2e^2}{h} T_{el}(E), \quad (3.16)$$

siendo e la carga eléctrica del electrón y $T_{el}(E)$ es la transmitancia electrónica.

En particular, la transmitancia tanto fonónica como electrónica de las dobles cadenas se obtiene de

$$T_{ph}(\omega^2) = [T_{\tilde{u}}(\omega^2) + T_{\tilde{d}}(\omega^2)]/2 \quad \text{y} \quad T_{el}(E) = [T_{\tilde{u}}(E) + T_{\tilde{d}}(E)]/2, \quad (3.17)$$

donde \tilde{u} y \tilde{d} indican las cadenas independientes obtenidas en la ecuación (B.28) cuyas transmitancias son calculadas mediante (B.20) para los fonones y (B.23) para los electrones.

1.- Caso periódico. En la Figura 3.13 se muestra la transmitancia calculada a partir de la ecuación (3.17) en una doble cadena periódica.

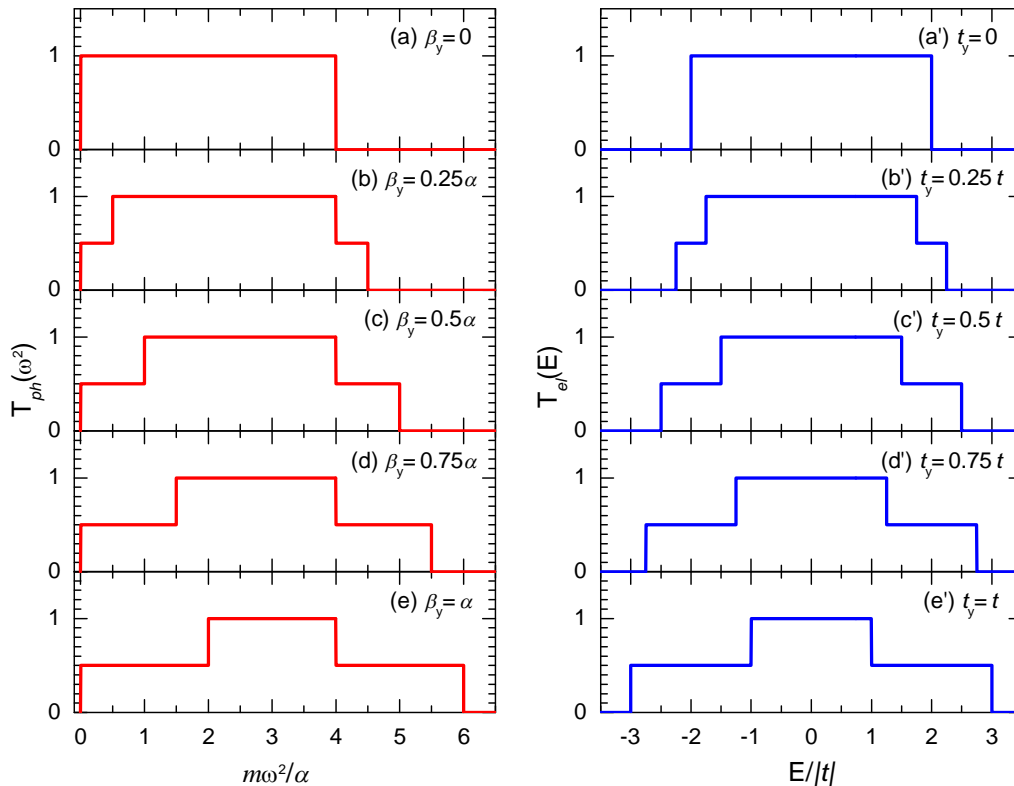


Figura 3.13 Transmitancia fonónica (T_{ph}) y electrónica (T_{el}) para una doble cadena periódica con β_y igual a (a) 0, (b) 0.25α , (c) 0.5α , (d) 0.75α y (e) α para los modos longitudinales (líneas rojas), mientras que t_y igual a (a') 0, (b') $0.25t$, (c') $0.5t$, (d') $0.75t$ y (e') t para los electrones (líneas azules).

En la figura 3.13, se tiene β_y igual a (a) 0, (b) 0.25α , (c) 0.5α , (d) 0.75α y (e) α para los modos longitudinales fonónicos, mientras que t_y igual a (a') 0, (b') $0.25t$, (c') $0.5t$, (d') $0.75t$ y (e') t para los electrones. Obsérvese la semejanza entre las Figuras 3.10 y 3.13, excepto por un factor de normalización.

2.- Caso cuasiperiódico LM. En la Figura 3.14 se presenta la transmisión para una doble cadena de Fibonacci de generación $n=39$ con 102334156 átomos por cadena con $\beta_y = \alpha_A$ y α_B igual a (a) $0.8\alpha_A$, (b) $0.9\alpha_A$ y (c) α_A para los modos longitudinales fonónicos (LM), mientras que $t_y = t_A$ y t_B igual a (a') $0.8t_A$, (b') $0.9t_A$ y (c') t_A para los electrones.

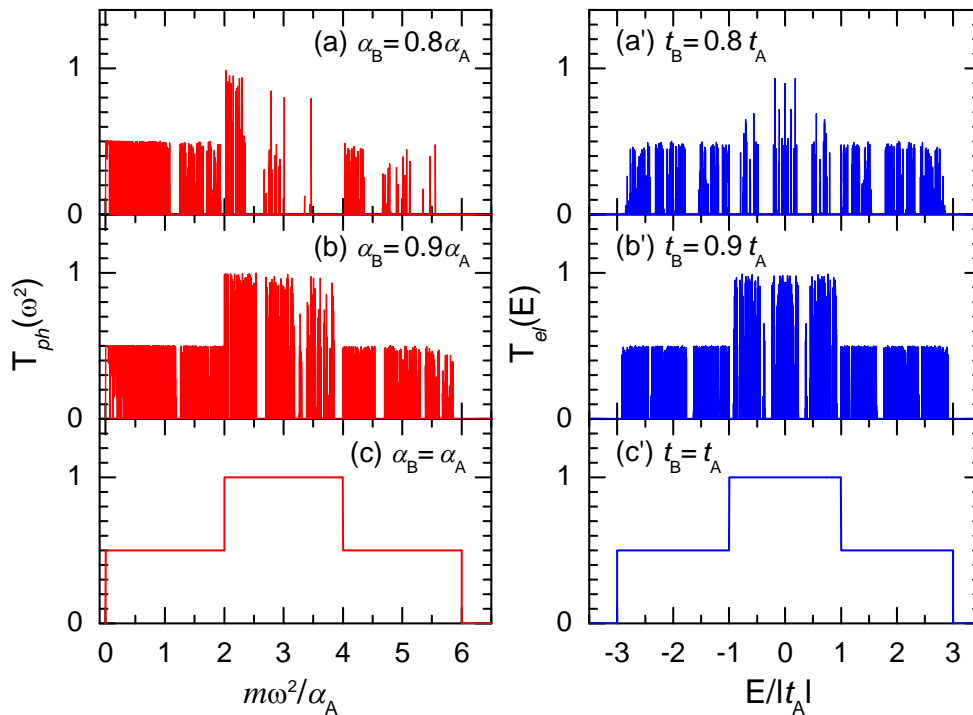


Figura 3.14 Transmitancia fonónica (T_{ph}) y electrónica (T_{el}) para una doble cadena de Fibonacci con $\beta_y = \alpha_A$ y α_B igual a (a) $0.8\alpha_A$, (b) $0.9\alpha_A$ y (c) α_A para los modos longitudinales (líneas rojas), mientras que $t_y = t_A$ y t_B igual a (a') $0.8t_A$, (b') $0.9t_A$ y (c') t_A para los electrones (líneas azules).

3.- Caso cuasiperiódico TM. La Figura 3.15 presenta la transmitancia para los modos vibraciones transversales en la dirección y (TMY) con $\alpha_y = 2\beta_A$ y β_B igual a (a) $0.8\beta_A$, (b) $0.9\beta_A$ y (c) β_A , mientras que $\beta_y = \beta_A$ y β_B igual a (a') $0.8\beta_A$, (b') $0.9\beta_A$ y (c') β_A para los modos transversales en la dirección z (TMZ).

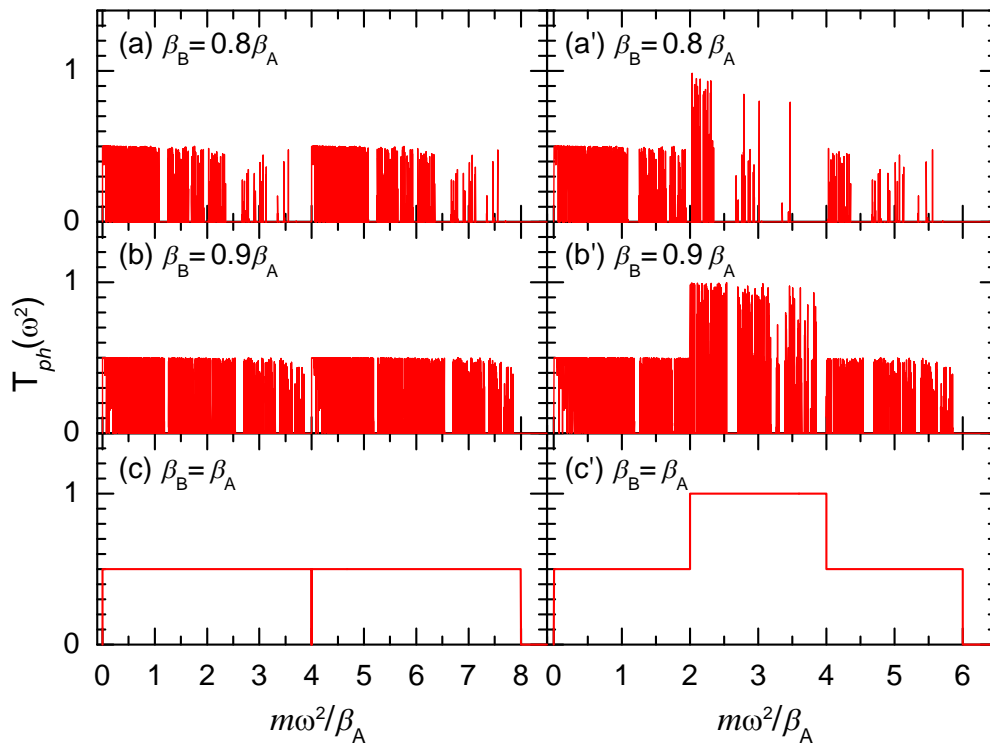


Figura 3.15 Transmitancia fonónica (T_{ph}) de una doble cadena de Fibonacci con $\alpha_y = 2\beta_A$ y β_B igual a (a) $0.8\beta_A$, (b) $0.9\beta_A$ y (c) β_A para los modos transversales en la dirección y (LMY), mientras que $\beta_y = \beta_A$ y β_B igual a (a') $0.8\beta_A$, (b') $0.9\beta_A$ y (c') β_A para los modos transversales en la dirección z (LMZ).

3.3 Resumen de los Resultados

En las secciones anteriores se han presentado los resultados agrupándolos por cantidades físicas. A continuación se muestran dichos resultados en forma comparativa para cada sistema analizado.

1.- Caso cuasiperiódico LM. En la Figura 3.16 se ilustran (a) y (a') la densidad de estado (DOS), (b) y (b') la longitud de localización (ξ), (c) y (c') la transmitancia (T) para las excitaciones fonónicas (líneas rojas) y electrónicas (líneas azules), respectivamente. El sistema estudiado en la Figura 3.16 es una doble cadena de Fibonacci para la generación $n=39$ con 102334156 átomos por cadena con $\beta_y = \alpha_A$ y $\alpha_B = 0.8\alpha_A$ para los modos longitudinales fonónicos (LM), mientras que $t_y = t_A$ y $t_B = 0.8t_A$ para los electrones.

Nótese la similitud entre las Figuras 3.16(b) y (c), así como entre (b') y (c'), la cual indica que la longitud de localización obtenida a partir del coeficiente de Lyapunov podría ser una buena medida para cuantificar la capacidad de transporte de un estado cuántico en un

sistema cuasiperiódico. La DOS proporciona información sobre las frecuencias o energías permitidas y prohibidas, en contraste con la longitud de localización o transmitancia que revela la naturaleza de los estados asociados a estas frecuencias o energías. Parece existir una tendencia de localizar en menor grado los estados acústicos así como los estados electrónicos que se encuentran en el centro de la banda.

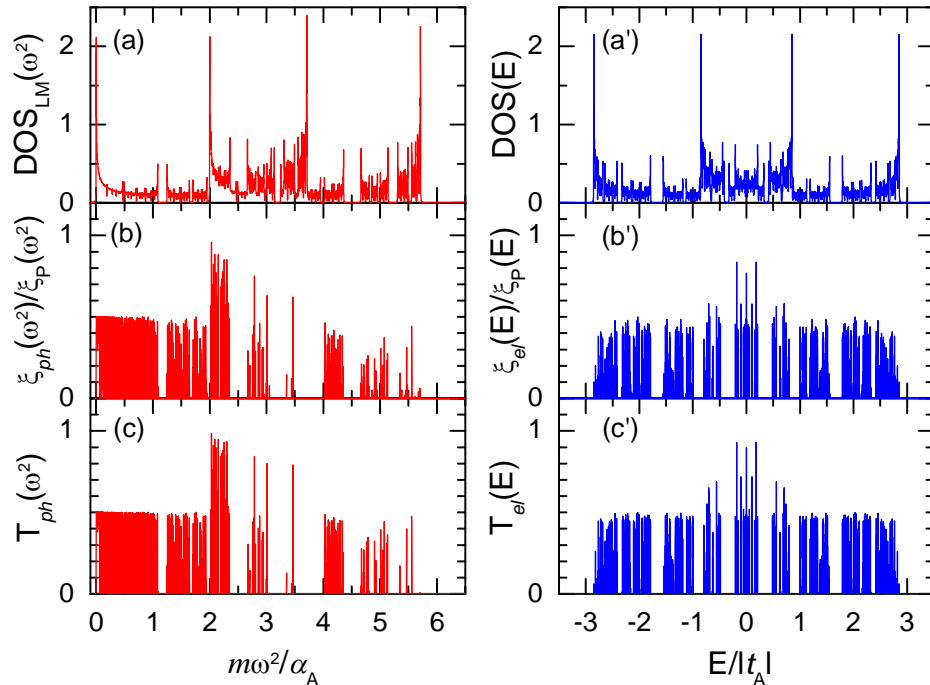


Figura 3.16 Densidad de estados (DOS), longitud de localización (ξ) y transmitancia (T) para una doble cadena de Fibonacci con $\beta_y = \alpha_A$ y $\alpha_B = 0.8\alpha_A$ para los modos longitudinales fonónicos (líneas rojas), mientras que $t_y = t_A$ y $t_B = 0.8t_A$ para los electrones (líneas azules).

La Figura 3.17 es similar a la Figura 3.16, excepto que $\alpha_B = 0.9\alpha_A$ para los modos longitudinales fonónicos (líneas rojas), mientras que $t_B = 0.9t_A$ para los electrones (líneas azules). Se puede observar en este caso una menor porcentaje de frecuencias o energías prohibidas, así como una menor localización comparando con la figura 3.16, ya que el desorden cuasiperiódico es de menor intensidad.

La Figura 3.18 es similar a la Figura 3.17, excepto que $\beta_y = \alpha_A/2$ para los modos longitudinales fonónicos (líneas rojas), mientras que $t_y = t_A/2$ para los electrones (líneas azules). Obsérvese que los espectros de la Figura 3.18 tienen un mayor traslape entre los dos espectros derivados de cada cadena efectiva, lo cual conduce a una menor aparición de brechas prohibidas.

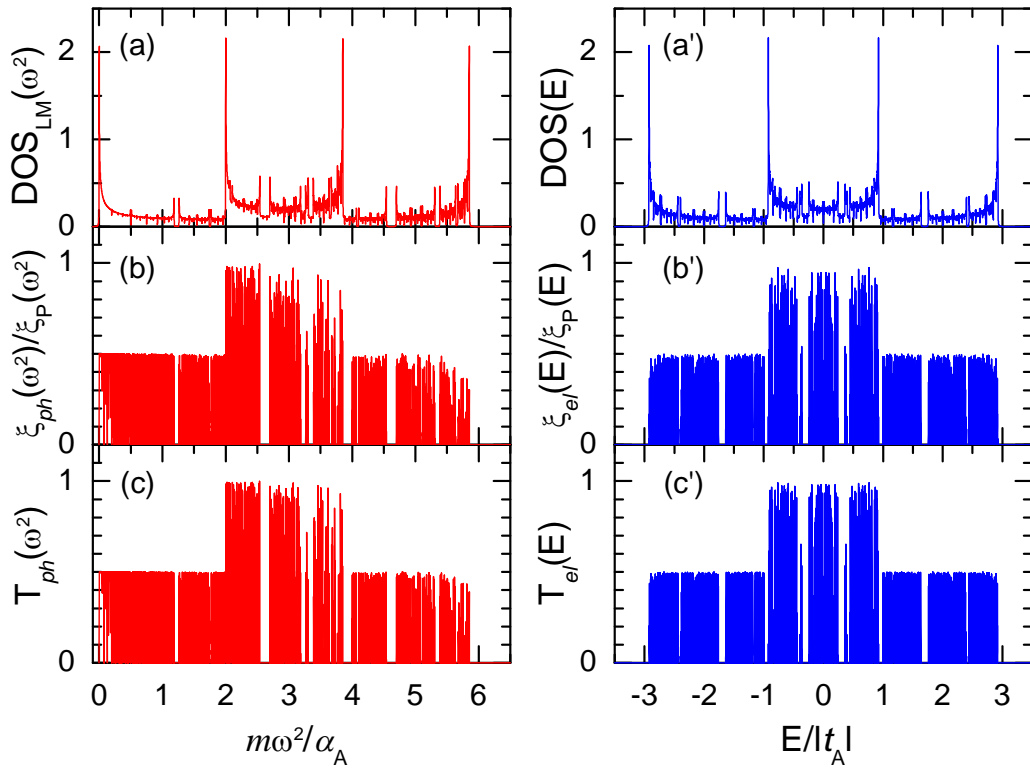


Figura 3.17 Lo mismo que la Figura 3.16 excepto por $\alpha_B = 0.9\alpha_A$ para los fonones (líneas rojas) y $t_B = 0.9t_A$ para los electrones (líneas azules).

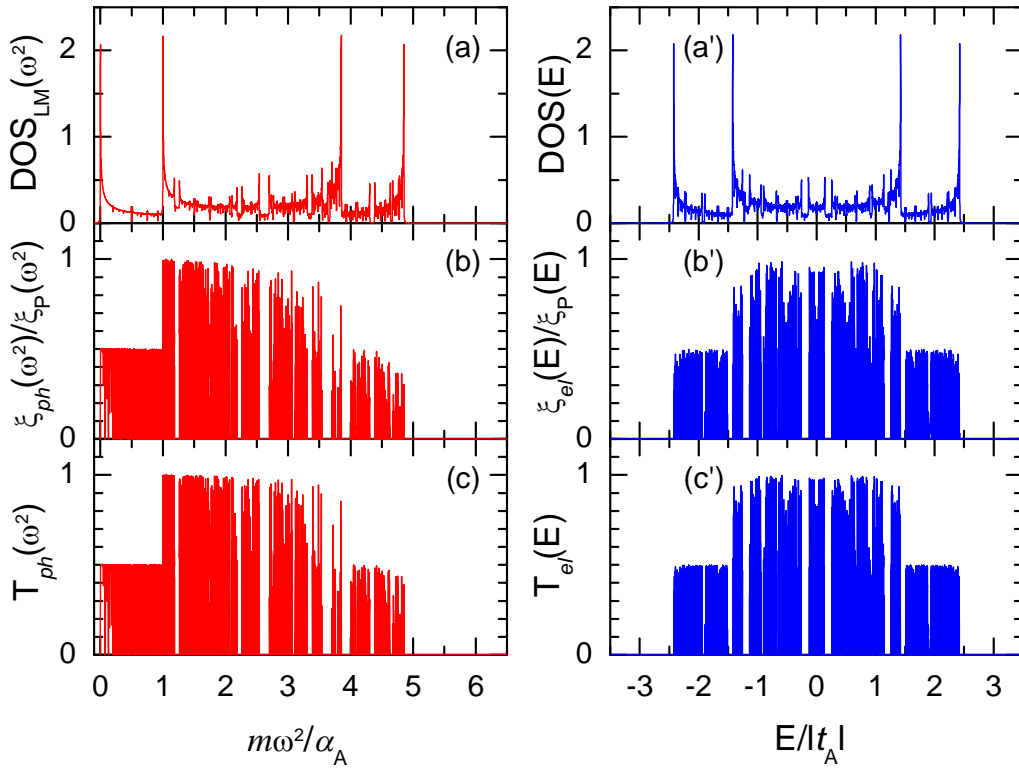


Figura 3.18 Lo mismo que la Figura 3.17 excepto por $\beta_y = \alpha_A/2$ para los fonones (líneas rojas) y $t_y = t_A/2$ para los electrones (líneas azules).

2.- Caso cuasiperiódico TM. En la Figura 3.19 se presentan (a) y (a') la densidad de estado (DOS), (b) y (b') la longitud de localización (ξ), (c) y (c') la transmitancia (T) para los modos transversales dirección y (LMY) con $\alpha_y = 2\beta_A$ y dirección z (TMZ) con $\beta_y = \beta_A$, respectivamente. El sistema estudiado en la Figura 3.19 es una doble cadena de Fibonacci para la generación $n=39$ con 102334156 átomos por cadena con $\beta_B = 0.9\beta_A$.

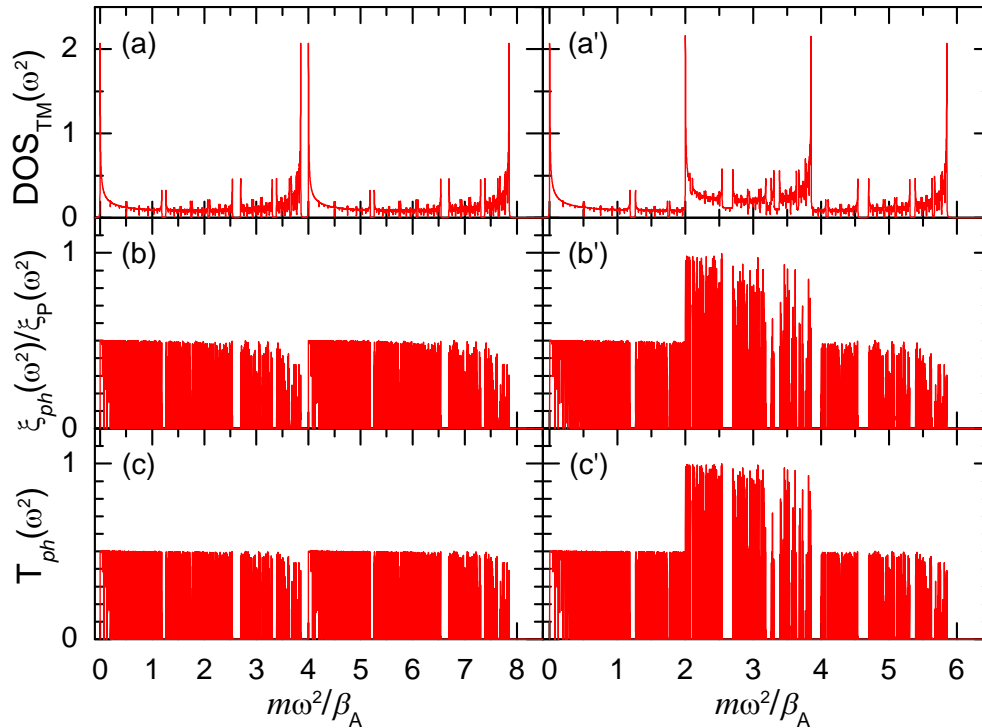


Figura 3.19 Densidad de estados (DOS), longitud de localización (ξ) y transmitancia (T) para una doble cadena de Fibonacci con $\beta_B = 0.9\beta_A$ y $\alpha_y = 2\beta_A$ para los modos transversales en la dirección y (LMY), mientras que $\beta_y = \beta_A$ para la dirección z (LMZ).

Obsérvese que los estados transversales en la dirección y (LMY) cuyas frecuencias se encuentran en $4\beta_A \leq m\omega^2 \leq 5\beta_A$ tienen una apariencia acústica y son poco afectados por la presencia del desorden cuasiperiódico, a pesar de su mayor frecuencia de vibración.

Conclusiones

En esta tesis hemos presentado una extensión del método de renormalización en el espacio real y aplicado al caso del problema de enlaces en una doble cadena de Fibonacci en forma de escalera tanto para fonones como para electrones. En particular, el estudio de las excitaciones fonónicas se realizó dentro del modelo de Born-von Karman, mientras que el de los electrones se llevo a cabo usando el modelo de amarre fuerte a primeros vecinos. Hemos analizado la densidad de estados, la longitud de localización derivada del coeficiente de Lyapunov y la conductancia de Landauer de dicha doble cadena con una longitud de 102334156 átomos por cadena.

Los principales resultados de esta tesis se resumen a continuación:

- 1.- Hemos logrado extender el método de renormalización a sistemas con multigrado de libertad por celda, utilizando el formalismo de matriz de matrices y aprovechando la conmutabilidad de la traza de un producto de matrices.
- 2.- Dicha extensión del método fue aplicado como ejemplo al problema de una doble cadena, permitiendo analizar el caso mixto que consiste en una cadena periódica enlazada a otra cuasiperiódica.
- 3.- El concepto de cadenas efectivas parece ser una herramienta útil para el estudio de nanoalambres o nanotubos con pocos grados de libertad por sección transversal.
- 4.- Los sistemas cuasiperiódicos cúbicamente estructurados descritos por el modelo de Born-von Karman o el de amarre fuerte son separables, es decir, se puede emplear el teorema de convolución en combinación con el método de renormalización.
- 5.- La cuasiperiodicidad produce una estructura de bandas con múltiples brechas de frecuencias o energías prohibidas, cuyo ordenamiento es frecuentemente autosimilar ante cambio de escala.
- 6.- Existe una asimetría entre las respuestas de las excitaciones fonónicas y electrónicas ante el desorden cuasiperiódico, por ejemplo, al aumentar el desorden en los fonones la localización inicia a partir de los estados ópticos, mientras que en los electrones comienza a partir de los dos extremos de la banda.
- 7.- La estructura de bandas correspondiente a los sistemas de múltiples cadenas es sumamente sensible a la interacción entre éstas, es decir,

la aparición y desaparición de las brechas y/o pseudobrechas energéticas en la densidad de estados pueden ser controlado a través de los parámetros de enlace entre dichas cadenas.

- 8.- Cuando los enlaces entre cadenas son doblemente más fuertes que aquellos en las cadenas, existen estados de naturaleza similares a los estados acústicos en una región de frecuencias mayores, los cuales tienen poca o nula influencia del desorden estructural.

Cabe mencionar que existen esencialmente dos métodos capaces de abordar sistemas de tamaño macroscópico usando la capacidad de cómputo actual, ellos son el espacio recíproco y el método de renormalización. La ausencia de periodicidad en materiales no cristalinos impide el uso del primero quedándose el segundo como la única alternativa. Además, el método de renormalización en el espacio real introducido por Leo Kadanoff permite la existencia de superficies e interfaces en el sistema, lo cual puede ser utilizado para el diseño de los dispositivos electrónicos basado en modelos cuánticos.

La extensión del método de renormalización presentada en esta tesis se encuentra todavía en proceso de desarrollo, por ejemplo, aún falta probar su compatibilidad con el teorema de convolución para un número grande de grados de libertad por celda. Sin embargo, se espera que dicha extensión podría ser útil en el estudio de las propiedades fonónicas y electrónicas de grafeno, nanotubos de carbono, entre otros, así como aplicarse a otras propiedades físicas tales como la conductividad térmica y eléctrica vía la fórmula de Kubo-Greenwood, y propiedades ópticas tales como espectroscopía Raman e infrarrojo, ya que éstas pueden expresarse en términos de la función de Green [Elliott, 1974]. Por último, estas propiedades físicas son fácilmente medibles en el laboratorio, por lo que los resultados teóricos obtenidos podrían ser verificados experimentalmente [Alfaro, 2011].

Apéndice A Función de Green

La función de Green se define como la solución de la ecuación diferencial no homogénea de Dyson [Economou, 2006]

$$[z - \hat{L}]G(z) = 1, \quad (\text{A.1})$$

con las condiciones de frontera apropiadas del problema, z es una variable compleja definida por $z = E + i\eta$ y \hat{L} es un operador hermitiano, lineal e independiente del tiempo que posee un conjunto ortonormal y completo de eigenfunciones $\{|n\rangle\}$ satisfaciendo las mismas condiciones de frontera que $G(z)$, es decir,

$$\hat{L}|\kappa\rangle = \lambda_\kappa |\kappa\rangle \quad \text{con} \quad \langle \kappa | \kappa' \rangle = \delta_{\kappa, \kappa'} \quad \text{y} \quad \sum_\kappa |\kappa\rangle \langle \kappa| = \mathbf{I}. \quad (\text{A.2})$$

En particular, para el caso de las excitaciones fonónicas la ecuación (A.1) puede escribirse en forma matricial con $z = m\omega^2 + i\eta$ de la forma

$$[z\mathbf{I} - \Phi] \mathbf{G}(z) = \mathbf{I} \quad (\text{A.3})$$

donde \mathbf{I} , Φ y \mathbf{G} son respectivamente las matrices identidad, dinámica y de Green de tamaño $3N \times 3N$, siendo N el número total de átomos en el sistema. En general, la matriz dinámica está dada por

$$\Phi_{\mu\nu}(i, j) = \frac{\partial^2 V}{\partial u_\mu(i) \partial u_\nu(j)}. \quad (\text{A.4})$$

donde $u_\mu(i)$ es la componente μ del desplazamiento del átomo i respecto a su posición de equilibrio y V es el potencial de interacción interatómica. Por ejemplo, en el modelo de Born-von Karman se tiene [Torres, 1985]

$$\begin{aligned} V &= \sum_{i < j} V_{i,j} = \sum_{i < j} \left\{ \frac{1}{2} \alpha \{ [\mathbf{u}(i) - \mathbf{u}(j)] \cdot \hat{\mathbf{r}}_{i,j} \}^2 + \frac{1}{2} \beta |\hat{\mathbf{r}}_{i,j} \times [\mathbf{u}(i) - \mathbf{u}(j)] \times \hat{\mathbf{r}}_{i,j}|^2 \right\} \\ &= \frac{1}{2} (\alpha - \beta) \sum_{i < j} \{ [\mathbf{u}(i) - \mathbf{u}(j)] \cdot \hat{\mathbf{r}}_{i,j} \}^2 + \frac{1}{2} \beta \sum_{i < j} |\mathbf{u}(i) - \mathbf{u}(j)|^2, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

donde $\hat{\mathbf{r}}_{i,j}$ es el vector unitario entre vecinos más cercanos, α y β son las constantes de fuerza central y no central, respectivamente.

Usando (A.2), la ecuación de Dyson (A.3) puede reescribirse como

$$\mathbf{G}(z) = \frac{\mathbf{I}}{z\mathbf{I} - \Phi} = \sum_\kappa \frac{|\kappa\rangle \langle \kappa|}{z - E_\kappa} \quad (\text{A.6})$$

siendo $\Phi|\kappa\rangle = E_\kappa|\kappa\rangle$.

Por otro lado, dada la siguiente identidad de variable compleja [Merzbacher, 1970]

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x), \quad (\text{A.7})$$

donde P indica la parte principal, la ecuación (A.6) se convierte en

$$\mathbf{G}(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{\kappa} \frac{|\kappa\rangle\langle\kappa|}{E + i\eta - E_\kappa} = \sum_{\kappa} |\kappa\rangle\langle\kappa| \left[P\left(\frac{1}{E - E_\kappa}\right) - i\pi\delta(E - E_\kappa) \right]. \quad (\text{A.8})$$

Entonces la traza de la función de Green es

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\mathbf{G}(E)] &\equiv \sum_j \langle j | \mathbf{G}(E) | j \rangle = P\left(\sum_{\kappa, j} \frac{\langle j | \kappa \rangle \langle \kappa | j \rangle}{E - E_\kappa} \right) - i\pi \sum_{\kappa, j} \delta(E - E_\kappa) \langle j | \kappa \rangle \langle \kappa | j \rangle \\ &= P\left(\sum_{\kappa} \frac{\langle \kappa | \sum_j | j \rangle \langle j | | \kappa \rangle}{E - E_\kappa} \right) - i\pi \sum_{\kappa} \delta(E - E_\kappa) \langle \kappa | \sum_j | j \rangle \langle j | | \kappa \rangle \\ &= P\left(\sum_{\kappa} \frac{1}{E - E_\kappa} \right) - i\pi \sum_{\kappa} \delta(E - E_\kappa) \end{aligned} \quad , \quad (\text{A.9})$$

donde $\sum_{\kappa} \delta(E - E_\kappa)$ es la densidad de estados (*DOS*), por lo que [Economou, 2006]

$$DOS(E) \equiv \sum_{\kappa} \delta(E - E_\kappa) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{\text{Tr}[\mathbf{G}(E)]\} = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im}\{\text{Tr}[\mathbf{G}(E + i\eta)]\}, \quad (\text{A.10})$$

ya que el término de la parte principal en la ecuación (A.9) es real.

En resumen, la densidad de estados se puede obtener a partir de la función de Green a través de la ecuación (A.10). Para el caso de excitaciones fonónicas, $E = m\omega^2$ y la matriz dinámica Φ contiene la información tanto de la estructura como de la interacción interatómica en el sistema y determina la función de Green fonónica por medio de la ecuación de Dyson (A.3).

Apéndice B Matrices de Transferencia

Para las excitaciones fonónicas en el modo longitudinal se considera una cadena de N átomos con interacciones $\alpha_{i,i+1}$ entre sitios vecinos más cercanos i e $i+1$, las ecuaciones de movimiento son

$$-m_i\omega^2 u_i = \alpha_{i,i+1}(u_{i+1} - u_i) - \alpha_{i-1,i}(u_i - u_{i-1}) \quad (\text{B.1})$$

donde u_i es el desplazamiento del i -ésimo átomo con respecto a su posición de equilibrio.

En el caso de las excitaciones electrónicas se considera una cadena de N átomos con autoenergías ε_i y las integrales de salto $t_{i,i+1}$ entre sitios vecinos más cercanos i e $i+1$. Dentro del modelo de amarre fuerte, la ecuación de Schrödinger estacionaria es

$$t_{i-1,i}c_{i-1} + \varepsilon_i c_i + t_{i,i+1}c_{i+1} = E c_i \quad (\text{B.2})$$

donde c_i es el vector de la amplitudes de la función de onda en la base Wannier.

En representación matricial la ecuación (B.1) y la ecuación (B.2) se pueden escribir de la forma siguiente

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{T}_i \mathbf{X}_i \quad (\text{B.3})$$

donde \mathbf{X}_i es el vector amplitud y \mathbf{T}_i la matriz de transferencia. Para las excitaciones fonónicas se tiene

$$\mathbf{X}_i = \mathbf{U}_i = \begin{pmatrix} u_i \\ u_{i-1} \end{pmatrix} \quad (\text{B.4})$$

y

$$\mathbf{T}_i \equiv \begin{pmatrix} \frac{\alpha_{i,i+1} + \alpha_{i-1,i} - m_i\omega^2}{\alpha_{i,i+1}} & -\frac{\alpha_{i-1,i}}{\alpha_{i,i+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.5})$$

mientras que para las excitaciones electrónicas es

$$\mathbf{X}_i = \mathbf{C}_i = \begin{pmatrix} c_i \\ c_{i-1} \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

y

$$\mathbf{T}_i \equiv \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_i}{t_{i,i+1}} & -\frac{t_{i-1,i}}{t_{i,i+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.7})$$

Entonces la correlación entre los átomos extremos es

$$\mathbf{X}_{N+1} = \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \cdots \mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1 \mathbf{X}_1 = \check{\mathbf{T}} \mathbf{X}_1, \quad (\text{B.8})$$

donde

$$\check{\mathbf{T}} \equiv \prod_{i=N}^1 \mathbf{T}_i = \begin{pmatrix} \tau_{1,1} & \tau_{1,2} \\ \tau_{2,1} & \tau_{2,2} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.9})$$

Esta sucesión de matrices de transferencia $\{\mathbf{T}_i\}$ depende del ordenamiento de los átomos en la cadena, es decir, para una red periódica todas las matrices de transferencia son iguales y existe solución analítica para los elementos $\tau_{i,j}$ [Born, 1965]. Para una red cuasiperiódica, las matrices tienen un orden cuasiperiódico y los elementos $\tau_{i,j}$ se calculan en forma numérica.

La transmitancia es una medida de la capacidad de transmisión de partícula a lo largo del sistema. Frecuentemente, dicho sistema está conectado a dos saturadores periódicos semi-infinitos en sus extremos, de manera que las funciones de onda dentro de los saturadores tienen la forma

$$x_l(k) = \begin{cases} Ae^{ikla} + Be^{-ikla}, & l \leq 1 \\ Ce^{ikla} + De^{-ikla}, & l \geq N \end{cases}. \quad (\text{B.10})$$

Cuando la excitación elemental incide del lado izquierdo, se tiene el vector de onda $k > 0$, $A=1$, $B=r$, $C=t$ y $D=0$, donde r y t son los coeficientes de reflexión y transmisión que satisfacen la relación

$$|r|^2 + |t|^2 = 1. \quad (\text{B.11})$$

Usando las ecuaciones (B.8) y (B.10) tenemos

$$\mathbf{X}_{N+1}(k) = \check{\mathbf{T}} \mathbf{X}_1(k), \quad (\text{B.12})$$

es decir,

$$\begin{pmatrix} te^{ik(N+1)a} \\ te^{ikNa} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{1,1} & \tau_{1,2} \\ \tau_{2,1} & \tau_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} + re^{-ika} \\ 1+r \end{pmatrix}. \quad (\text{B.13})$$

Equivalentemente, la ecuación (B.13) puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} te^{ikNa} \\ 0 \end{pmatrix} &\equiv \tilde{\mathbf{T}} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{\tau}_{1,1} & \tilde{\tau}_{1,2} \\ \tilde{\tau}_{2,1} & \tilde{\tau}_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \tau_{1,1} & \tau_{1,2} \\ \tau_{2,1} & \tau_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

donde

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_{1,1} &= [\tau_{1,2} - \tau_{2,1} + \tau_{1,1}e^{ika} - \tau_{2,2}e^{-ika}] / 2i \sin(ka), \\ \tilde{\tau}_{1,2} &= [(\tau_{1,1} - \tau_{2,2})e^{-ika} - \tau_{2,1}e^{-2ika} + \tau_{1,2}] / 2i \sin(ka), \\ \tilde{\tau}_{2,1} &= [(\tau_{2,2} - \tau_{1,1})e^{ika} + \tau_{2,1}e^{2ika} - \tau_{1,2}] / 2i \sin(ka), \\ \tilde{\tau}_{2,2} &= [\tau_{2,1} - \tau_{1,2} + \tau_{2,2}e^{ika} - \tau_{1,1}e^{-ika}] / 2i \sin(ka). \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

ya que

$$\begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{2i \sin(ka)} \begin{pmatrix} 1 & -e^{-ika} \\ -1 & e^{ika} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.16})$$

Resolviendo las ecuaciones (B.14) se obtienen

$$t = \frac{2i \sin(ka) (\tau_{12}\tau_{21} - \tau_{11}\tau_{22}) e^{-ikNa}}{\tau_{12} + \tau_{11}e^{-ika} - (\tau_{21} + \tau_{22}e^{ika})} \quad (\text{B.17})$$

y

$$r = \frac{e^{ika} (\tau_{22} + \tau_{21}e^{ika}) - (\tau_{12} + \tau_{11}e^{ika})}{\tau_{12} + \tau_{11}e^{-ika} - (\tau_{21} + \tau_{22}e^{ika})}. \quad (\text{B.18})$$

Para las excitaciones fonónicas en el modo longitudinal, la relación de dispersión en los saturadores periódicos es

$$\omega^2 = \frac{2\alpha}{m} [1 - \cos(ka)], \quad (\text{B.19})$$

donde ω es la frecuencia de vibración. Al sustituir ésta en las ecuaciones (B.17) y (B.18) se obtienen la transmitancia

$$|t|^2 = \frac{(4m\omega^2/\alpha)(1 - m\omega^2/4\alpha)[\tau_{12}\tau_{21} - \tau_{11}\tau_{22}]^2}{[\tau_{12} - \tau_{21} + (\tau_{11} - \tau_{22})(1 - m\omega^2/2\alpha)]^2 + (\tau_{11} + \tau_{22})^2 m\omega^2/\alpha (1 - m\omega^2/4\alpha)} \quad (\text{B.20})$$

y la reflectancia

$$|r|^2 = \frac{[\tau_{11} - \tau_{22} + (\tau_{12} - \tau_{21})(1 - m\omega^2/2\alpha)]^2 + (\tau_{12} + \tau_{21})^2 m\omega^2/\alpha (1 - m\omega^2/4\alpha)}{[\tau_{12} - \tau_{21} + (\tau_{11} - \tau_{22})(1 - m\omega^2/2\alpha)]^2 + (\tau_{11} + \tau_{22})^2 m\omega^2/\alpha (1 - m\omega^2/4\alpha)}. \quad (\text{B.21})$$

Mientras que para los electrones dentro del modelo de amarre fuerte a primeros vecinos, la relación de dispersión en los saturadores periódicos es

$$E = 2t \cos(ka), \quad (\text{B.22})$$

donde E es la energía del electrón. Al sustituirla en las ecuaciones (B.17) y (B.18) se obtienen la transmitancia

$$|t|^2 = \frac{(4 - E^2/t^2)[\tau_{12}\tau_{21} - \tau_{11}\tau_{22}]^2}{[\tau_{12} - \tau_{21} + (\tau_{11} - \tau_{22})E/2t]^2 + (\tau_{11} + \tau_{22})^2(1 - E^2/4t^2)} \quad (\text{B.23})$$

y la reflectancia

$$|r|^2 = \frac{[\tau_{11} - \tau_{22} + (\tau_{12} - \tau_{21})E/2t]^2 + (\tau_{12} + \tau_{21})^2(1 - E^2/4t^2)}{[\tau_{12} - \tau_{21} + (\tau_{11} - \tau_{22})E/2t]^2 + (\tau_{11} + \tau_{22})^2(1 - E^2/4t^2)}. \quad (\text{B.24})$$

En resumen, la matriz de transferencia proporciona una alternativa para calcular tanto la conductividad a través de la fórmula de Landauer como el coeficiente de Lyapunov para cuantificar la localización mediante la ecuación (B.14) incluyendo los saturadores periódicos.

Para abordar alambres multicanales con interacciones entre sí se puede extender el formalismo de matrices de transferencia discutido anteriormente a matrices de tamaño $2l \times 2l$ para un sistema de l canales con la condición de que los canales tienen el mismo ordenamiento de las autoenergías y los enlaces entre éstos sean iguales [Heinrichs, 2002]. Como ejemplo, estudiaremos con detalle el caso $l=2$ para el modo longitudinal fonónico como se muestra en la Figura B.1

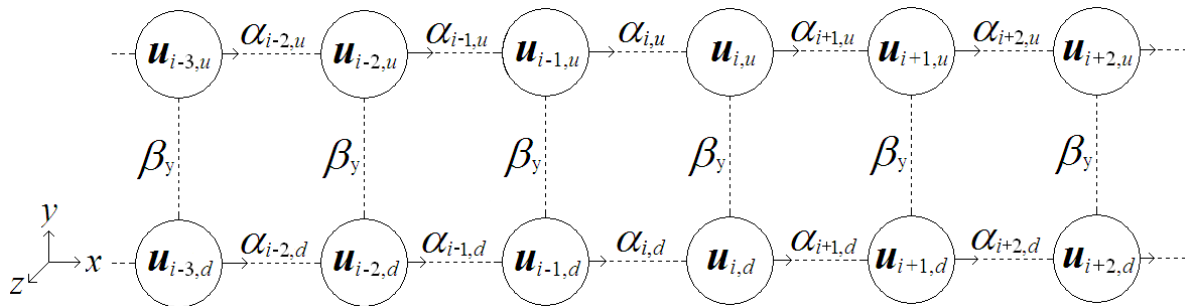


Figura B.1 Modo longitudinal fonónico en una doble cadena cuasiperiódica con interacción entre vecinos más cercanos con parámetros de fuerza central $\alpha_{i,s}$ y no central β_y . Las amplitudes de desplazamiento se indican en los círculos.

La ecuación de movimiento para el modo longitudinal fonónico en una doble cadena arbitraria se puede escribir como

$$\begin{pmatrix} \alpha_{i+1,u}u_{i+1,u} + \alpha_{i,u}u_{i-1,u} \\ \alpha_{i+1,d}u_{i+1,d} + \alpha_{i,d}u_{i-1,d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{i+1,u} + \alpha_{i,u} + \beta_y - m\omega^2 & -\beta_y \\ -\beta_y & \alpha_{i+1,d} + \alpha_{i,d} + \beta_y - m\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{i,u} \\ u_{i,d} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.25})$$

Sean $\tilde{u}_{i,s}$ la nueva amplitud de desplazamiento dada por

$$\begin{pmatrix} \tilde{u}_{i,u} \\ \tilde{u}_{i,d} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{i,u} \\ u_{i,d} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.26})$$

entonces, la ecuación de movimiento (B.25) puede reescribirse como

$$\begin{pmatrix} \alpha_{i+1,u}\tilde{u}_{i+1,u} + \alpha_{i,u}\tilde{u}_{i-1,u} \\ \alpha_{i+1,d}\tilde{u}_{i+1,d} + \alpha_{i,d}\tilde{u}_{i-1,d} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \varepsilon_{i,u} + \varepsilon_{i,d} - 2m\omega^2 & \varepsilon_{i,u} - \varepsilon_{i,d} \\ \varepsilon_{i,u} - \varepsilon_{i,d} & \varepsilon_{i,u} + \varepsilon_{i,d} + 4\beta_y - 2m\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}_{i,u} \\ \tilde{u}_{i,d} \end{pmatrix} \quad (\text{B.27})$$

donde $\varepsilon_{i,s} = \alpha_{i+1,s} + \alpha_{i,s}$ con $s = u$ o d . Para el caso de que la cadena superior es idéntica a la cadena inferior se tiene $\varepsilon_{i,u} = \varepsilon_{i,d} = \varepsilon_i$, por lo que la ecuación (B.27) en el formalismo de matriz de transferencia de 4×4 es

$$\begin{pmatrix} \tilde{u}_{i+1,u} \\ \tilde{u}_{i,u} \\ \tilde{u}_{i+1,d} \\ \tilde{u}_{i,d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\alpha_{i+1,u} + \alpha_{i,u} - m\omega^2}{\alpha_{i+1,u}} & -\frac{\alpha_{i,u}}{\alpha_{i+1,u}} & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\alpha_{i+1,d} + \alpha_{i,d} + 2\beta_y - m\omega^2}{\alpha_{i+1,d}} & -\frac{\alpha_{i,d}}{\alpha_{i+1,d}} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}_{i,u} \\ \tilde{u}_{i-1,u} \\ \tilde{u}_{i,d} \\ \tilde{u}_{i-1,d} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.28})$$

La ecuación (B.28) se puede interpretar como dos cadenas independientes con la diferencia de sus eigen-frecuencias por $2\beta_y$. Por lo que el problema de una doble cadena simétrica -cadena superior igual a la inferior- siempre puede ser tratada como dos cadenas independientes con sus respectivos saturadores periódicos semi-infinitos distintos entre sí.

Apéndice C Renormalización en Cadenas Simples

La ecuación (2.53) establece que la densidad de estados (*DOS*) es proporcional a la traza de la función de Green,

$$DOS(E, n) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \left[\text{Tr} \mathbf{G}^{(n)}(z) \right], \quad (\text{C.1})$$

donde $z \equiv E + i\eta$. Dicha traza, siendo suma de los elementos diagonales de la función de Green, puede expresarse como una función de los sitios extremos L y R , es decir,

$$\text{Tr} \mathbf{G}^{(n)}(z) = A(z, n)G_{L,L}^{(n)}(z) + B(z, n)G_{R,R}^{(n)}(z) + C(z, n)G_{L,R}^{(n)}(z) + D(z, n). \quad (\text{C.2})$$

En particular, para el problema de enlaces se tiene

$$\text{Tr} \mathbf{G}^{(n)}(z) = \text{Tr} \mathbf{G}^{(n-1)}(z) + \text{Tr} \mathbf{G}^{(n-2)}(z) - G_{M,M}^{(n)}(z), \quad (\text{C.3})$$

donde las trazas de generaciones $n-1$ y $n-2$ pueden escribirse en términos de la función de Green de la generación n , esto es

$$\begin{aligned} \text{Tr} \mathbf{G}^{(n-1)}(z) &= A(z, n-1)G_{L,L}^{(n-1)}(z) + B(z, n-1)G_{R,R}^{(n-1)}(z) + C(z, n-1)G_{L,R}^{(n-1)}(z) + D(z, n-1) \\ &= A(z, n-1)G_{L,L}^{(n)}(z) + B(z, n-1)G_{M,M}^{(n)}(z) + C(z, n-1)G_{L,M}^{(n)}(z) + D(z, n-1), \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

$$\begin{aligned} \text{Tr} \mathbf{G}^{(n-2)}(z) &= A(z, n-2)G_{L,L}^{(n-2)}(z) + B(z, n-2)G_{R,R}^{(n-2)}(z) + C(z, n-2)G_{L,R}^{(n-2)}(z) + D(z, n-2) \\ &= A(z, n-2)G_{M,M}^{(n)}(z) + B(z, n-2)G_{R,R}^{(n)}(z) + C(z, n-2)G_{M,R}^{(n)}(z) + D(z, n-2). \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Para la generación n las ecuaciones de Dyson similares a las ecuaciones (2.42)-(2.44) son

$$[z - E_L(z, n-1)]G_{L,l}^{(n)}(z) - \alpha(z, n-1)G_{M,l}^{(n)}(z) = \delta_{L,l} \quad (\text{C.6})$$

$$[z - E_M(z, n)]G_{M,l}^{(n)}(z) - \alpha(z, n-1)G_{L,l}^{(n)}(z) - \alpha(z, n-2)G_{R,l}^{(n)}(z) = \delta_{M,l} \quad (\text{C.7})$$

$$[z - E_R(z, n-2)]G_{R,l}^{(n)}(z) - \alpha(z, n-2)G_{M,l}^{(n)}(z) = \delta_{R,l} \quad (\text{C.8})$$

donde $l = L, R$ o M y la autoenergía del sitio medio proveniente de los procesos de renormalización de las generaciones $n-1$ y $n-2$ es

$$E_M(z, n) = E_R(z, n-1) + E_L(z, n-2). \quad (\text{C.9})$$

Nótese que las ecuaciones (C.6) y (C.8) no deben usarse para la renormalización, ya que en éstas se podría agregar términos extras por las nuevas condiciones de frontera durante el proceso de adición. De esta forma, las tres ecuaciones de (C.7) útiles para la renormalización son

$$[z - E_M(z, n)]G_{M,L}^{(n)}(z) - \alpha(z, n-1)G_{L,L}^{(n)}(z) - \alpha(z, n-2)G_{R,L}^{(n)}(z) = 0, \quad (\text{C.10})$$

$$[z - E_M(z, n)]G_{M,M}^{(n)}(z) - \alpha(z, n-1)G_{L,M}^{(n)}(z) - \alpha(z, n-2)G_{R,M}^{(n)}(z) = 1, \quad (\text{C.11})$$

$$[z - E_M(z, n)]G_{M,R}^{(n)}(z) - \alpha(z, n-1)G_{L,R}^{(n)}(z) - \alpha(z, n-2)G_{R,R}^{(n)}(z) = 0. \quad (\text{C.12})$$

Dado que el hamiltoniano \mathbf{H} es hermítico y real, la matriz $z\mathbf{I} - \mathbf{H}$ es simétrica y en consecuencia la función de Green también es una matriz simétrica, ya que [Meyer, 2000]

$$\mathbf{G}^T = [(z\mathbf{I} - \mathbf{H})^{-1}]^T = [(z\mathbf{I} - \mathbf{H})^T]^{-1} = [z\mathbf{I} - \mathbf{H}]^{-1} = \mathbf{G}. \quad (\text{C.13})$$

Así $G_{L,M}^{(n)}(z) = G_{M,L}^{(n)}(z)$, $G_{R,M}^{(n)}(z) = G_{M,R}^{(n)}(z)$ y $G_{R,L}^{(n)}(z) = G_{L,R}^{(n)}(z)$. Sustituyendo las ecuaciones (C.10) y (C.12) en la ecuación (C.11) se tiene que

$$\begin{aligned} [z - E_M(z, n)]G_{M,M}^{(n)}(z) - \alpha(z, n-1) \frac{\alpha(z, n-1)G_{L,L}^{(n)}(z) + \alpha(z, n-2)G_{L,R}^{(n)}(z)}{[z - E_M(z, n)]} \\ - \alpha(z, n-2) \frac{\alpha(z, n-1)G_{L,R}^{(n)}(z) + \alpha(z, n-2)G_{R,R}^{(n)}(z)}{[z - E_M(z, n)]} = 1 \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

la cual puede reescribirse como

$$\begin{aligned} G_{M,M}^{(n)}(z) = \frac{[\alpha(z, n-1)]^2 G_{L,L}^{(n)}(z)}{[z - E_M(z, n)]^2} + \frac{2\alpha(z, n-2)\alpha(z, n-1)G_{L,R}^{(n)}(z)}{[z - E_M(z, n)]^2} \\ + \frac{[\alpha(z, n-2)]^2 G_{R,R}^{(n)}(z)}{[z - E_M(z, n)]^2} + \frac{1}{z - E_M(z, n)}. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Sustituyendo (C.10), (C.12) y (C.15) en las ecuaciones (C.3) y (C.4), y el resultado a su vez en (C.2) se obtienen las siguientes relaciones de recurrencia

$$A(z, n) = A(z, n-1) + \Theta(z, n)[\theta_1(z, n)]^2 + C(z, n-1)\theta_1(z, n), \quad (\text{C.16})$$

$$B(z, n) = B(z, n-2) + \Theta(z, n)[\theta_2(z, n)]^2 + C(z, n-2)\theta_2(z, n), \quad (\text{C.17})$$

$$C(z, n) = C(z, n-1)\theta_2(z, n) + C(z, n-2)\theta_1(z, n) + 2\Theta(z, n)\theta_1(z, n)\theta_2(z, n), \quad (\text{C.18})$$

$$D(z, n) = D(z, n-1) + D(z, n-2) + \Theta(z, n)\theta_0(z, n) \quad (\text{C.19})$$

donde $\theta_0(z, n) \equiv 1/[z - E_M(z, n)]$, $\theta_1(z, n) \equiv \alpha(z, n-1)\theta_0(z, n)$, $\theta_2(z, n) \equiv \alpha(z, n-2)\theta_0(z, n)$ y $\Theta(z, n) \equiv A(z, n-2) + B(z, n-1) - 1$.

Por otro lado, se sustituye la Ec. (C.7) en (C.6) y (C.8) obteniendo

$$[z - E_L(z, n-1) - \alpha(z, n-1)\theta_1(z, n)]G_{L,l}^{(n)}(z) - \alpha(z, n-1)\theta_2(z, n)G_{R,l}^{(n)}(z) = \delta_{L,l} + \theta_1(z, n)\delta_{M,l}, \quad (\text{C.20})$$

$$[z - E_R(z, n-2) - \alpha(z, n-2)\theta_2(z, n)]G_{R,l}^{(n)}(z) - \alpha(z, n-1)\theta_2(z, n)G_{L,l}^{(n)}(z) = \delta_{R,l} + \theta_2(z, n)\delta_{M,l}. \quad (\text{C.21})$$

donde $l=L$ o R . De estas ecuaciones, se pueden identificar las autoenergías e interacción efectivas como

$$E_L(z,n) = E_L(z,n-1) + \alpha(z,n-1)\theta_1(z,n), \quad (\text{C.22})$$

$$E_R(z,n) = E_R(z,n-2) + \alpha(z,n-2)\theta_2(z,n), \quad (\text{C.23})$$

$$\alpha(z,n) = \alpha(z,n-1)\theta_2(z,n). \quad (\text{C.24})$$

Resolviendo las cuatro ecuaciones (C.20) y (C.21) para la función de Green en los sitios extremos, se obtienen

$$G_{L,L}^{(n)}(z) = \frac{z - E_R(z,n)}{[z - E_L(z,n)][z - E_R(z,n)] - [\alpha(z,n)]^2}, \quad (\text{C.25})$$

$$G_{R,R}^{(n)}(z) = \frac{z - E_L(z,n)}{[z - E_L(z,n)][z - E_R(z,n)] - [\alpha(z,n)]^2}, \quad (\text{C.26})$$

$$G_{L,R}^{(n)}(z) = G_{R,L}^{(n)}(z) = \frac{\alpha(z,n)}{[z - E_L(z,n)][z - E_R(z,n)] - [\alpha(z,n)]^2}. \quad (\text{C.27})$$

Las condiciones iniciales son

$$E_L(z,1)=E_R(z,1)=\alpha(z,1)=\varepsilon_1, \quad A(z,1) = B(z,1) = 1, \quad C(z,1) = D(z,1) = 0, \quad (\text{C.28})$$

$$\begin{aligned} E_L(z,2) &= \alpha_A + \alpha_A^2/(z - \varepsilon_2), \quad E_R(z,2) = \alpha_B + \alpha_B^2/(z - \varepsilon_2), \quad \alpha(z,2) = \alpha_A \alpha_B / (z - \varepsilon_2), \\ A(z,2) &= 1 + \alpha_A^2/[z - \varepsilon_2]^2, \quad B(z,2) = 1 + \alpha_B^2/[z - \varepsilon_2]^2, \\ C(z,2) &= \alpha_A \alpha_B / [z - \varepsilon_2]^2, \quad D(z,2) = 1/[z - \varepsilon_2]. \end{aligned} \quad (\text{C.29})$$

Cabe mencionar que para las excitaciones fonónicas

$$E = m\omega^2, \quad z = m\omega^2 + i\eta, \quad \varepsilon_1 = \alpha_A, \quad \varepsilon_2 = \alpha_A + \alpha_B, \quad \varepsilon_3 = \alpha_B, \quad (\text{C.30})$$

mientras para electrones $z = E + i\eta$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 0$, t_A y t_B en lugar de α_A y α_B .

Apéndice D Renormalización en Cadenas Complejas

Para el caso de una cadena con dos átomos por celda, la traza de la función de Green tiene la forma

$$\text{Tr} \mathbf{G}^{(n)}(z) = \sum_{j,s} G_{js,js}^{(n)}(z) = \sum_s \text{Tr} \mathbf{g}_{s,s}^{(n)}(z) = \text{Tr} \sum_s \mathbf{g}_{s,s}^{(n)}(z) \quad (\text{D.1})$$

donde j es el índice de celda y $s = u$ o d indica la posición atómica *up* o *down* dentro de la celda. En general, se tiene

$$\text{Tr} \sum_s \mathbf{g}_{s,s}^{(n)}(z) = \text{Tr} \{ \mathbf{A}(z,n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) + \mathbf{B}(z,n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z,n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z,n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) + \mathbf{F}(z,n) \} \quad (\text{D.2})$$

siendo $\mathbf{g}_{s,s}^{(n)}(z)$, $\mathbf{A}(z,n)$, $\mathbf{B}(z,n)$, $\mathbf{C}(z,n)$, $\mathbf{D}(z,n)$ y $\mathbf{F}(z,n)$ matrices de tamaño 2×2 . En particular, para el problema de enlaces se tiene

$$\sum_s \mathbf{g}_{s,s}^{(n)}(z) = \sum_s \mathbf{g}_{s,s}^{(n-1)}(z) + \sum_s \mathbf{g}_{s,s}^{(n-2)}(z) - \mathbf{g}_{M,M}^{(n)}(z) \quad (\text{D.3})$$

donde

$$\begin{aligned} \sum_s \mathbf{g}_{s,s}^{(n-1)}(z) &= \mathbf{A}(z,n-1) \mathbf{g}_{L,L}^{(n-1)}(z) + \mathbf{B}(z,n-1) \mathbf{g}_{R,R}^{(n-1)}(z) + \mathbf{C}(z,n-1) \mathbf{g}_{L,R}^{(n-1)}(z) + \mathbf{D}(z,n-1) \mathbf{g}_{R,L}^{(n-1)}(z) + \mathbf{F}(z,n-1) \\ &= \mathbf{A}(z,n-1) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) + \mathbf{B}(z,n-1) \mathbf{g}_{M,M}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z,n-1) \mathbf{g}_{L,M}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z,n-1) \mathbf{g}_{M,L}^{(n)}(z) + \mathbf{F}(z,n-1), \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

$$\begin{aligned} \sum_s \mathbf{g}_{s,s}^{(n-2)}(z) &= \mathbf{A}(z,n-2) \mathbf{g}_{L,L}^{(n-2)}(z) + \mathbf{B}(z,n-2) \mathbf{g}_{R,R}^{(n-2)}(z) + \mathbf{C}(z,n-2) \mathbf{g}_{L,R}^{(n-2)}(z) + \mathbf{D}(z,n-2) \mathbf{g}_{R,L}^{(n-2)}(z) + \mathbf{F}(z,n-2) \\ &= \mathbf{A}(z,n-2) \mathbf{g}_{M,M}^{(n)}(z) + \mathbf{B}(z,n-2) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z,n-2) \mathbf{g}_{M,R}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z,n-2) \mathbf{g}_{R,M}^{(n)}(z) + \mathbf{F}(z,n-2). \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

La ecuación de Dyson, $(z\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{G}^{(n)}(z) = \mathbf{I}$, para la generación n es

$$\begin{pmatrix} z\mathbf{I} - \mathbf{E}_L(z,n-1) & -\boldsymbol{\alpha}(z,n-1) & \mathbf{0} \\ -[\boldsymbol{\alpha}(z,n-1)]^T & z\mathbf{I} - \mathbf{E}_M(z,n) & -\boldsymbol{\alpha}(z,n-2) \\ \mathbf{0} & -[\boldsymbol{\alpha}(z,n-2)]^T & z\mathbf{I} - \mathbf{E}_R(z,n-2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) & \mathbf{g}_{L,M}^{(n)}(z) & \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) \\ \mathbf{g}_{M,L}^{(n)}(z) & \mathbf{g}_{M,M}^{(n)}(z) & \mathbf{g}_{M,R}^{(n)}(z) \\ \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) & \mathbf{g}_{R,M}^{(n)}(z) & \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) \end{pmatrix} = \mathbf{I} \quad (\text{D.6})$$

donde $\mathbf{g}_{i,j}^{(n)}(z) \equiv \begin{pmatrix} G_{iu,ju}^{(n)}(z) & G_{iu,jd}^{(n)}(z) \\ G_{id,ju}^{(n)}(z) & G_{id,jd}^{(n)}(z) \end{pmatrix}$, $\mathbf{E}_j(z,n) \equiv \begin{pmatrix} E_{ju}(z,n) & \alpha_{ju,jd}(z,n) \\ \alpha_{jd,ju}(z,n) & E_{jd}(z,n) \end{pmatrix}$ y

$\boldsymbol{\alpha}(z,n) \equiv \begin{pmatrix} \alpha_{Lu,Ru}(z,n) & \alpha_{Lu,Rd}(z,n) \\ \alpha_{Ld,Ru}(z,n) & \alpha_{Ld,Rd}(z,n) \end{pmatrix}$. Dado que \mathbf{H} y $\mathbf{G}^{(n)}(z)$ son matrices

simétricas, sus submatrices tienen la siguiente propiedad de simetría

$$\mathbf{g}_{i,j}^{(n)}(z) = [\mathbf{g}_{j,i}^{(n)}(z)]^T, \quad (\text{D.7})$$

es decir, $\mathbf{g}_{L,M}^{(n)}(z) = [\mathbf{g}_{M,L}^{(n)}(z)]^T$, $\mathbf{g}_{R,M}^{(n)}(z) = [\mathbf{g}_{M,R}^{(n)}(z)]^T$ y $\mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) = [\mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z)]^T$. La ecuación (D.6) puede reescribirse como

$$[z\mathbf{I} - \mathbf{E}_L(z,n-1)]\mathbf{g}_{L,l}^{(n)}(z) - \boldsymbol{\alpha}(z,n-1)\mathbf{g}_{M,l}^{(n)}(z) = \delta_{L,l}\mathbf{I}, \quad (\text{D.8})$$

$$[z\mathbf{I} - \mathbf{E}_M(z, n)]\mathbf{g}_{M,l}^{(n)}(z) - [\boldsymbol{\alpha}(z, n-1)]^T \mathbf{g}_{L,l}^{(n)}(z) - \boldsymbol{\alpha}(z, n-2)\mathbf{g}_{R,l}^{(n)}(z) = \delta_{M,l} \mathbf{I}, \quad (\text{D.9})$$

$$[z\mathbf{I} - \mathbf{E}_R(z, n-2)]\mathbf{g}_{R,l}^{(n)}(z) - [\boldsymbol{\alpha}(z, n-2)]^T \mathbf{g}_{M,l}^{(n)}(z) = \delta_{R,l} \mathbf{I} \quad (\text{D.10})$$

donde $l = L, M$ o R y la autoenergía del sitio medio proveniente de las renormalizaciones de las generaciones $n-1$ y $n-2$ es

$$\mathbf{E}_M(z, n) = \mathbf{E}_R(z, n-1) + \mathbf{E}_L(z, n-2). \quad (\text{D.11})$$

Las tres ecuaciones de (D.9) útiles para la renormalización son

$$[z\mathbf{I} - \mathbf{E}_M(z, n)]\mathbf{g}_{M,L}^{(n)}(z) - [\boldsymbol{\alpha}(z, n-1)]^T \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) - \boldsymbol{\alpha}(z, n-2)\mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) = \mathbf{0}, \quad (\text{D.12})$$

$$[z\mathbf{I} - \mathbf{E}_M(z, n)]\mathbf{g}_{M,M}^{(n)}(z) - [\boldsymbol{\alpha}(z, n-1)]^T \mathbf{g}_{L,M}^{(n)}(z) - \boldsymbol{\alpha}(z, n-2)\mathbf{g}_{R,M}^{(n)}(z) = \mathbf{I}, \quad (\text{D.13})$$

$$[z\mathbf{I} - \mathbf{E}_M(z, n)]\mathbf{g}_{M,R}^{(n)}(z) - [\boldsymbol{\alpha}(z, n-1)]^T \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) - \boldsymbol{\alpha}(z, n-2)\mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) = \mathbf{0}. \quad (\text{D.14})$$

En particular, las ecuaciones (D.12) y (D.14) se pueden reescribir como

$$\mathbf{g}_{M,L}^{(n)}(z) = \boldsymbol{\theta}_1(z, n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) + \boldsymbol{\theta}_2(z, n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z), \quad (\text{D.15})$$

$$\mathbf{g}_{M,R}^{(n)}(z) = \boldsymbol{\theta}_1(z, n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) + \boldsymbol{\theta}_2(z, n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z), \quad (\text{D.16})$$

donde $\boldsymbol{\theta}_1(z, n) \equiv \boldsymbol{\theta}_0(z, n) [\boldsymbol{\alpha}(z, n-1)]^T$, $\boldsymbol{\theta}_2(z, n) \equiv \boldsymbol{\theta}_0(z, n) \boldsymbol{\alpha}(z, n-2)$ y $\boldsymbol{\theta}_0(z, n) \equiv [z\mathbf{I} - \mathbf{E}_M(z, n)]^{-1}$.

Así

$$\mathbf{g}_{L,M}^{(n)}(z) = [\mathbf{g}_{M,L}^{(n)}(z)]^T = \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_1(z, n)]^T + \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_2(z, n)]^T, \quad (\text{D.17})$$

$$\mathbf{g}_{R,M}^{(n)}(z) = [\mathbf{g}_{M,R}^{(n)}(z)]^T = \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_1(z, n)]^T + \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_2(z, n)]^T. \quad (\text{D.18})$$

Al sustituir estas ecuaciones en (D.13) se tiene que

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{M,M}^{(n)}(z) &= \boldsymbol{\theta}_1(z, n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_1(z, n)]^T + \boldsymbol{\theta}_1(z, n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_2(z, n)]^T \\ &\quad + \boldsymbol{\theta}_2(z, n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_1(z, n)]^T + \boldsymbol{\theta}_2(z, n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_2(z, n)]^T + \boldsymbol{\theta}_0(z, n). \end{aligned} \quad (\text{D.19})$$

Sustituyendo las ecuaciones (D.15)-(D.19) en (D.4) y (D.5), el resultado a su vez en (D.3) se obtiene la siguiente ecuación,

$$\begin{aligned} \sum_s \mathbf{g}_{s,s}^{(n)}(z) &= \boldsymbol{\Theta}(z, n) \{ \boldsymbol{\theta}_1(z, n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_1(z, n)]^T + \boldsymbol{\theta}_1(z, n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_2(z, n)]^T + \boldsymbol{\theta}_0(z, n) \\ &\quad + \boldsymbol{\theta}_2(z, n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_1(z, n)]^T + \boldsymbol{\theta}_2(z, n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_2(z, n)]^T \} + \mathbf{A}(z, n-1) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) \\ &\quad + \mathbf{B}(z, n-2) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z, n-1) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_1(z, n)]^T + \mathbf{C}(z, n-1) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_2(z, n)]^T \\ &\quad + \mathbf{C}(z, n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z, n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z, n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z, n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z, n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z, n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) \\ &\quad + \mathbf{D}(z, n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z, n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z, n-2) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_1(z, n)]^T \\ &\quad + \mathbf{D}(z, n-2) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_2(z, n)]^T + \mathbf{F}(z, n-1) + \mathbf{F}(z, n-2). \end{aligned} \quad (\text{D.20})$$

donde $\Theta(z,n) \equiv \mathbf{A}(z,n-2) + \mathbf{B}(z,n-1) - \mathbf{I}$. Dado que nos interesa $\text{Tr} \sum_s \mathbf{g}_{s,s}^{(n)}(z)$ y $\text{Tr}(\mathbf{RS}) = \text{Tr}(\mathbf{SR})$ para cualquier matriz \mathbf{R} y \mathbf{S} cuadrada [Meyer, 2000],

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \sum_s \mathbf{g}_{s,s}^{(n)}(z) = & \text{Tr} \{ \Theta(z,n) \theta_0(z,n) + [\theta_1(z,n)]^T \Theta(z,n) \theta_1(z,n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) \\
& + [\theta_2(z,n)]^T \Theta(z,n) \theta_1(z,n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) + [\theta_1(z,n)]^T \Theta(z,n) \theta_2(z,n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) \\
& + [\theta_2(z,n)]^T \Theta(z,n) \theta_2(z,n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) + \mathbf{A}(z,n-1) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) + \mathbf{B}(z,n-2) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) \\
& + [\theta_1(z,n)]^T \mathbf{C}(z,n-1) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) + [\theta_2(z,n)]^T \mathbf{C}(z,n-1) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) + \mathbf{F}(z,n-1) \quad (\text{D.21}) \\
& + \mathbf{C}(z,n-2) \theta_1(z,n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z,n-2) \theta_2(z,n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) \\
& + \mathbf{D}(z,n-1) \theta_1(z,n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z,n-1) \theta_2(z,n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) \\
& + [\theta_1(z,n)]^T \mathbf{D}(z,n-2) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) + [\theta_2(z,n)]^T \mathbf{D}(z,n-2) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) + \mathbf{F}(z,n-2) \}.
\end{aligned}$$

Comparando (D.21) con (D.2) se obtienen las siguientes relaciones de recurrencia

$$\mathbf{A}(z,n) = \mathbf{A}(z,n-1) + \mathbf{D}(z,n-1) \theta_1(z,n) + [\theta_1(z,n)]^T \mathbf{C}(z,n-1) + [\theta_1(z,n)]^T \Theta(z,n) \theta_1(z,n), \quad (\text{D.22})$$

$$\mathbf{B}(z,n) = \mathbf{B}(z,n-2) + \mathbf{C}(z,n-2) \theta_2(z,n) + [\theta_2(z,n)]^T \mathbf{D}(z,n-2) + [\theta_2(z,n)]^T \Theta(z,n) \theta_2(z,n), \quad (\text{D.23})$$

$$\mathbf{C}(z,n) = \mathbf{C}(z,n-2) \theta_1(z,n) + [\theta_2(z,n)]^T \mathbf{C}(z,n-1) + [\theta_2(z,n)]^T \Theta(z,n) \theta_1(z,n), \quad (\text{D.24})$$

$$\mathbf{D}(z,n) = \mathbf{D}(z,n-1) \theta_2(z,n) + [\theta_1(z,n)]^T \mathbf{D}(z,n-2) + [\theta_1(z,n)]^T \Theta(z,n) \theta_2(z,n), \quad (\text{D.25})$$

$$\mathbf{F}(z,n) = \Theta(z,n) \theta_0(z,n) + \mathbf{F}(z,n-1) + \mathbf{F}(z,n-2). \quad (\text{D.26})$$

Por otro lado, las funciones de Green para la generación n se pueden obtener a partir de la ecuación (D.6) o específicamente se sustituye la ecuación (D.9) en (D.8) y (D.10), esto es,

$$\begin{aligned}
\mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) = & \{ z\mathbf{I} - \mathbf{E}_L(z,n-1) - \alpha(z,n-1) \theta_1(z,n) - \alpha(z,n-1) \theta_2(z,n) \\
& \times [z\mathbf{I} - \mathbf{E}_R(z,n-2) - [\alpha(z,n-2)]^T \theta_2(z,n)]^{-1} [\alpha(z,n-2)]^T \theta_1(z,n) \}^{-1}, \quad (\text{D.27})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) = & \{ z\mathbf{I} - \mathbf{E}_R(z,n-2) - [\alpha(z,n-2)]^T \theta_2(z,n) - [\alpha(z,n-2)]^T \theta_1(z,n) \\
& \times [z\mathbf{I} - \mathbf{E}_L(z,n-1) - \alpha(z,n-1) \theta_1(z,n)]^{-1} \alpha(z,n-1) \theta_2(z,n) \}^{-1}, \quad (\text{D.28})
\end{aligned}$$

$$\mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) = [z\mathbf{I} - \mathbf{E}_R(z,n-2) - [\alpha(z,n-2)]^T \theta_2(z,n)]^{-1} [\alpha(z,n-2)]^T \theta_1(z,n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z), \quad (\text{D.29})$$

$$\mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) = [z\mathbf{I} - \mathbf{E}_L(z,n-1) - \alpha(z,n-1) \theta_1(z,n)]^{-1} \alpha(z,n-1) \theta_2(z,n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z). \quad (\text{D.30})$$

Asimismo, sustituyendo la ecuación (D.9) en (D.8) y (D.10), se obtienen las submatrices de interacción y de autoenergía para la

generación n , las cuales se determinan mediante las siguientes relaciones de recurrencia

$$\boldsymbol{\alpha}(z,n) = \boldsymbol{\alpha}(z,n-1)[z\mathbf{I}-\mathbf{E}_M(z,n)]^{-1} \boldsymbol{\alpha}(z,n-2), \quad (\text{D.31})$$

$$\mathbf{E}_L(z,n) = \mathbf{E}_L(z,n-1) + \boldsymbol{\alpha}(z,n-1)[z\mathbf{I}-\mathbf{E}_M(z,n)]^{-1} [\boldsymbol{\alpha}(z,n-1)]^T, \quad (\text{D.32})$$

$$\mathbf{E}_R(z,n) = \mathbf{E}_R(z,n-2) + [\boldsymbol{\alpha}(z,n-2)]^T [z\mathbf{I}-\mathbf{E}_M(z,n)]^{-1} \boldsymbol{\alpha}(z,n-2). \quad (\text{D.33})$$

Por último, las condiciones iniciales para el cálculo de la *DOS* son

$$\mathbf{A}(z,1)=\mathbf{B}(z,1)=\mathbf{I}, \quad \mathbf{C}(z,1)=\mathbf{D}(z,1)=\mathbf{F}(z,1)=\mathbf{0}, \quad (\text{D.34})$$

$$\mathbf{A}(z,2)=\mathbf{I}+[\boldsymbol{\theta}_1(z,2)]^T \boldsymbol{\theta}_1(z,2), \quad \mathbf{B}(z,2)=\mathbf{I}+[\boldsymbol{\theta}_2(z,2)]^T \boldsymbol{\theta}_2(z,2), \quad (\text{D.35})$$

$$\mathbf{C}(z,2)=[\boldsymbol{\theta}_2(z,2)]^T \boldsymbol{\theta}_1(z,2), \quad \mathbf{D}(z,2)=[\boldsymbol{\theta}_1(z,2)]^T \boldsymbol{\theta}_2(z,2), \quad \mathbf{F}(z,2)=\boldsymbol{\theta}_0(z,2). \quad (\text{D.36})$$

En particular, para el caso de dos cadenas de Fibonacci en forma de escalera con interacciones entre sí a primeros vecinos, como se muestra en la Figura 3.1(a), las condiciones iniciales para la excitación fonónica son

$$\boldsymbol{\alpha}(m\omega^2,1)=\begin{pmatrix} \alpha_A & 0 \\ 0 & \alpha_A \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}_L(m\omega^2,1)=\mathbf{E}_R(m\omega^2,1)=\begin{pmatrix} \alpha_A+\beta & \beta \\ \beta & \alpha_A+\beta \end{pmatrix}, \quad (\text{D.37})$$

$$\boldsymbol{\alpha}(m\omega^2,2)=\alpha_A \alpha_B \begin{pmatrix} m\omega^2-\alpha_A-\alpha_B-\beta & -\beta \\ -\beta & m\omega^2-\alpha_A-\alpha_B-\beta \end{pmatrix}^{-1}, \quad (\text{D.38})$$

$$\mathbf{E}_L(m\omega^2,2)=\begin{pmatrix} \alpha_A+\beta & \beta \\ \beta & \alpha_A+\beta \end{pmatrix} + \alpha_A^2 \begin{pmatrix} m\omega^2-\alpha_A-\alpha_B-\beta & -\beta \\ -\beta & m\omega^2-\alpha_A-\alpha_B-\beta \end{pmatrix}^{-1}, \quad (\text{D.39})$$

$$\mathbf{E}_R(m\omega^2,2)=\begin{pmatrix} \alpha_B+\beta & \beta \\ \beta & \alpha_B+\beta \end{pmatrix} + \alpha_B^2 \begin{pmatrix} m\omega^2-\alpha_A-\alpha_B-\beta & -\beta \\ -\beta & m\omega^2-\alpha_A-\alpha_B-\beta \end{pmatrix}^{-1}. \quad (\text{D.40})$$

Por otro lado, para el caso de los electrones las condiciones iniciales son

$$\boldsymbol{\alpha}(E,1)=\begin{pmatrix} t_A & 0 \\ 0 & t_A \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}_L(E,1)=\mathbf{E}_R(E,1)=\begin{pmatrix} 0 & t_y \\ t_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{D.41})$$

$$\boldsymbol{\alpha}(E,2)=t_A t_B \begin{pmatrix} E & -t_y \\ -t_y & E \end{pmatrix}^{-1}, \quad \mathbf{E}_L(E,2)=t_A^2 \begin{pmatrix} E & -t_y \\ -t_y & E \end{pmatrix}^{-1}, \quad \mathbf{E}_R(E,2)=t_B^2 \begin{pmatrix} E & -t_y \\ -t_y & E \end{pmatrix}^{-1}. \quad (\text{D.42})$$

En resumen, en este apéndice hemos desarrollado una extensión del método de renormalización para multigrados de libertad por sitio. Como ejemplo, se aplica esta extensión para una doble cadena de Fibonacci con interacción a primeros vecinos para fonones y electrones.

Referencias

- [Alfaro, 2011] P. Alfaro, R. Cisneros, M. Bizarro, M.Cruz-Irisson y C. Wang, Raman Scattering by Confined Optical Phonons in Si and Ge Nanostructures, *Nanoscale* **3**, 1246 (2011).
- [Anderson, 1958] P.W. Anderson, Absence of Diffusion in Certain Random Lattices, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [Ashcroft, 1976] Neil W. Ashcroft y N. David Mermin, Solid State Physics (Harcourt, 1976).
- [Ball, 1985] M.D. Ball y D.J. Lloyd, Particles Apparently Exhibiting Five-Fold Symmetry In Al-Li-Cu-Mg Alloys, *Scr. Metall.* **19**, 1065 (1985).
- [Bancel, 1986] P.A. Bancel y P.A. Heiney, Icosahedral Aluminum-Transition-Metal Alloys, *Phys. Rev. B* **33**, 7917 (1986).
- [Barrio, 1984] R.A. Barrio, F.L. Galeener y E. Martinez, Vibrational Bethe Lattice with Random Dihedral Angles, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1786 (1984).
- [Bendersky, 1985] L. Bendersky, Quasicrystal with One-Dimensional Translational Symmetry and a Tenfold Rotation Axis, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1461 (1985).
- [Besicovitch, 1932] A. S. Besicovitch, Almost Periodic Functions, (Cambridge University Press, 1932).
- [Born, 1965] M. Born y E. Wolf, Principles of Optics, 7th Ed. (Pergam Press, 1965) p. 71.
- [Dalvit, 1999] Diego A.R. Dalvit, J. Frastai y I.D. Lawrie, Problems of Statistical Mechanics (IOP Pub., 1999) p. 107.
- [Economou, 2006] E.N. Economou, Green's Function in Quantum Physics, 3rd Ed. (Springer-Verlag, 2006).
- [Elliott, 1974] R.J. Elliott, J.A. Krumhansl y P.L. Leath, The Theory and Properties of Randomly Disordered Crystals and Related Physical Systems, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 465 (1974).
- [Goldstein, 1980] H. Goldstein, Classical Mechanics, 2nd Ed. (Addison-Wesley, 1980).
- [Heinrichs, 2002] J. Heinrichs, Localization from Conductance in Few-Channel Disordered Wires, *Phys. Rev. B* **66**, 155434 (2002).

- [Ibach, 2009] H. Ibach y H. Lüth, *Solid-State Physics*, 4th Ed. (Springer-Verlag, 2009) p. 161.
- [Imry, 1999] Y. Imry y R. Landauer, Conductance Viewed as Transmission, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S306 (1999).
- [Janot, 1994] C. Janot, *Quasicrystals, a Premier*, 2nd Ed. (Oxford University Press, 1994) p. 35.
- [Jeong, 2011] C. Jeong, S. Datta y M. Lundstrom, Full Dispersion versus Debye Model Evaluation of Lattice Thermal Conductivity with a Landauer Approach, *J. Appl. Phys.* **109**, 073718 (2011).
- [Kadanoff, 1967] Leo P. Kadanoff, *et al.*, Static Phenomena Near Critical Points: Theory and Experiment, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 395 (1967).
- [Kittel, 1996] Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7th Ed. (John Wiley, 1996).
- [Levine, 1984] D. Levine y P.J. Steinhardt, Quasicrystals: a New Class of Ordered Structures, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2477 (1984).
- [Luo, 1993] Z. Luo, S. Zhang, Y. Tang y D. Zhao, Quasicrystals In As-Cast Mg-Zn-RE Alloys, *Scr. Metall.* **28**, 1513 (1993).
- [Maciá, 2000] E. Maciá, Thermal Conductivity of One-Dimensional Fibonacci Quasicrystals, *Phys. Rev. B* **61**, 6645 (2000).
- [Maciá, 2005] E. Maciá, F. Triozon y S. Roche, Contact-dependent effects and tunneling currents in DNA molecules, *Phys. Rev. B* **71**, 113106 (2005).
- [Marder, 2000] Michael P. Marder, *Condensed Matter Physics*, (John Wiley, 2000).
- [Matsuda, 2010] Iwao Matsuda, *et al.*, Electron Compound Nature in a Surface Atomic Layer of a Two-Dimensional Hexagonal Lattice, *Phys. Rev. B* **82**, 165330 (2010).
- [Merlin, 1985] R. Merlin K. Bajema, Roy Clarke, F.-Y. Juang y P.K. Bhattacharya, Quasiperiodic GaAs-AlAs Heterostructures, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1768 (1985).
- [Merzbacher, 1970] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd Ed. (John Wiley, 1970).
- [Meyer, 2000] C.D. Meyer, *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*, (Soc. Ind. Appl. Math., 2000) p.120.

- [Mott, 1990] Nevill F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, 2nd Ed. (Taylor & Francis, 1990) p.35.
- [Naumis, 1994] G.G. Naumis, R.A. Barrio y C. Wang, Effects of Frustration and Localization of States in the Penrose Lattice, *Phys. Rev. B* **50**, 9834 (1994).
- [Quilichini, 1997] M. Quilichini y T. Janssen, Phonon Excitations in Quasicrystals, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 277 (1997).
- [Salazar, 2003] F. Salazar, C. Wang, A. Gelover-Santiago, A. Zentella-Dehesa, G.G. Naumis y J. Talamantes, Phonon Localization in Quasiperiodic Systems, *J. of Non-Crystalline Solids* **329**, 167 (2003).
- [Sánchez, 2004] V. Sánchez y C. Wang, Application of Renormalization and Convolution Methods to the Kubo-Greenwood Formula in Multidimensional Fibonacci Systems, *Phys. Rev. B* **70**, 144207 (2004).
- [Shechtman, 1984] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias y J.W. Cahn, Metallic Phase with Long-range Orientational Order and No Translational Symmetry, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [Sütő, 1989] A. Sütő, Singular Continuous Spectrum on a Cantor Set of Zero Lebesgue Measure for the Fibonacci Hamiltonian, *J. Stat. Phys.* **56**, 525 (1989).
- [Tiggelen, 1999] B. A. van Tiggelen, *Localization of Waves en Diffuse Waves in Complex Media* Ed. por J. P. Fouque (Kluwer Academic, 1999) p. 7.
- [Todd, 1986] J. Todd, R. Merlin, R. Clarke, K.M. Mohanty y J.D. Axe, Synchrotron X-Ray Study of a Fibonacci Superlattices, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1157 (1986).
- [Torres, 1985] V.J.B. Torres y A.M. Stoneham, *Handbook of Interatomic Potentials - III Semiconductors* (Atomic Energy Research Establishment, Harwell, U.K., 1985).
- [Velhinho, 2000] M.T. Velhinho y I.R. Pimentel, Lyapunov Exponent for Pure and Random Fibonacci Chains, *Phys. Rev. B* **61**, 1043 (2000).
- [Wang, 1988] C. Wang y R.A. Barrio, Theory of the Raman Response in Fibonacci Superlattices, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 191 (1988).

- [Wilson, 1971] Kenneth G. Wilson, Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture, *Phys. Rev. B* **4**, 3174 (1971).
- [Yu, 2005] P. Yu y M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors, Physics and Materials Properties (Springer, 2005).
- [Ziman, 1979] John M. Ziman, Models of Disorder: the Theoretical Physics of Homogeneously Disordered Systems, 1st Ed. (Cambridge University Press, 1979).
- [Zou, 2008] X. Zou y S. Hovmöller, Electron Crystallography: Imaging and Single-Crystal Diffraction from Powders, *Acta Cryst.* **A64**, 149 (2008).